

## Tesis de Posgrado

# Emisión de radiación en colisiones ión-átomo en altas energías

González, Alejandro Daniel

1987

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias  
Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en [digital.bl.fcen.uba.ar](http://digital.bl.fcen.uba.ar). Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in [digital.bl.fcen.uba.ar](http://digital.bl.fcen.uba.ar). It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

**Cita tipo APA:**

González, Alejandro Daniel. (1987). Emisión de radiación en colisiones ión-átomo en altas energías. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.  
[http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis\\_2020\\_Gonzalez.pdf](http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2020_Gonzalez.pdf)

**Cita tipo Chicago:**

González, Alejandro Daniel. "Emisión de radiación en colisiones ión-átomo en altas energías". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1987.  
[http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis\\_2020\\_Gonzalez.pdf](http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2020_Gonzalez.pdf)

**EXACTAS** UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



**UBA**

Universidad de Buenos Aires

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Tema de Tesis

EMISION DE RADIACION EN COLISIONES ION-ATOMO EN ALTAS ENERGIAS

Autor

Alejandro Daniel González

Director de Tesis

Dr. Jorge Esteban Miraglia

Lugar de trabajo:

Grupo de Colisiones Atómicas

Instituto de Astronomía y Física del Espacio (CONICET)

Tesis presentada para optar al título de Doctor en Ciencias Físicas

Febrero 1987

- 2020 -  
y.2

Expreso mi agradecimiento ...

...a los Dres Jorge E. Miraglia, director de esta tesis,  
y Carlos R. Garibotti, por haberme apoyado y orientado  
acertadamente, durante la realización de este trabajo.

...al Lic. Manfred C. Pacher, por sus valiosas discusiones.

...al Instituto de Astronomía y Física del Espacio (IAFE),  
donde he realizado esta tesis, y en especial al servicio de  
cómputo y al de fotografía, por su colaboración.

...a mis compañeros del Grupo de Colisiones Atómicas del IAFE,  
por la colaboración que me han prestado.

...a mis compañeros de los Grupos de Colisiones Atómicas del  
Centro Atómico Bariloche, y del Instituto de Física Rosario,  
por su gran hospitalidad durante mi permanencia en Bariloche  
y Rosario.

...al Dr. Antoine Salin, por sus acertados conceptos.

...a mi esposa, por su valiosa colaboración en la conformación  
final de este trabajo.

## INDICE

	pag.
Resumen	1
Abstract	4
Lista de abreviaturas .....	6
1 Introducción	8
2 Formalismo general	
2.1 Hamiltoniano del sistema de tres cuerpos .....	14
2.2 Secciones eficaces .....	19
2.3 Aproximación dipolar .....	20
2.4 Radiación del centro de masa .....	22
2.5 Radiación entre sistemas .....	23
3 Captura electrónica radiativa	
3.1 Aspectos generales .....	31
3.2 Antecedentes .....	33
3.3 Modelo de 2 cuerpos .....	38
3.4 Modelo de 3 cuerpos .....	42
3.5 Aproximación de Born .....	45
3.6 Aproximación de onda distorsionada del continuo ....	47
3.7 Aproximación impulso .....	48
3.8 Espectros fotónicos en la primera aproximación de Born .....	49

3.9	Influencia de la descripción del blanco en los espectros .....	54
3.10	Captura electrónica mecánica .....	61
3.11	Comparación entre captura mecánica y radiativa .....	64
3.12	Ionización radiativa y captura al continuo .....	69
4	Procesos directos	
4.1	Descripción y antecedentes .....	72
4.2	Bremsstrahlung electrónico .....	75
4.3	Comparación entre el bremsstrahlung entre sistemas y el bremsstrahlung electrónico .....	80
4.4	Espectros fotónicos de dispersión elástica radiativa .....	82
4.5	Distribución angular de la radiación en dispersión elástica radiativa .....	84
4.6	Dependencia de la dispersión elástica radiativa con la carga del proyectil .....	86
4.7	Espectros fotónicos para excitación y desexcitación radiativa .....	87
4.8	Secciones eficaces totales de excitación radiativa .....	90
5	Conclusiones .....	92

pag.

Apéndice I	Unidades atómicas	94
Apéndice II :	Sistema de coordenadas y momentos asociados para el problema de tres cuerpos .....	96
Apéndice III:	Aproximación de Bethe y Salpeter para las integrales de Nordsieck	98
Apéndice IV :	Integrales del tipo de Nordsieck con funciones Eikonal Simétrica .....	101
Apéndice V :	Factores de Forma e integrales relacionadas .....	108
Referencias	.....	110
Descripción de las figuras	.....	121
Figuras	.....	128

## RESUMEN

Esta tesis trata sobre la teoría de la emisión de radiación continua de un sistema de tres partículas cargadas, en colisión: un proyectil pesado, un núcleo blanco y un electrón activo.

En el capítulo 2 se desarrolla el formalismo general con un tratamiento no relativista. El elemento de matriz de interacción materia-radiación se calcula en primer orden perturbativo, entre funciones de onda que satisfacen exactamente el Hamiltoniano mecánico, el cual incluye sólo las interacciones entre las partículas. Se encuentra que este elemento de matriz está compuesto por tres términos, que representan: el bremsstrahlung del centro de masa, el bremsstrahlung entre sistemas y el bremsstrahlung electrónico. En cada paso imponemos la propiedad de ortogonalidad de las funciones de onda. La teoría se desarrolla considerando el impulso del fotón, y luego, para tratar los casos particulares, se realiza la aproximación dipolar. En esta aproximación, el centro de masa no emite radiación. El bremsstrahlung entre sistemas engloba un concepto más general que el bremsstrahlung internuclear, usado hasta el presente. El bremsstrahlung electrónico se calcula usando distintas funciones de onda aproximadas. Estas son elegidas teniendo en cuenta su capacidad para describir correctamente el proceso mecánico.

Considerando un electrón activo en la colisión, la

radiación emitida se identifica como alguno de los siguientes cuatro procesos, a saber: captura electrónica radiativa, ionización radiativa, dispersión elástica radiativa, y excitación y desexcitación radiativa.

El capítulo 3 trata sobre la captura radiativa. Esta resulta ser, para determinados sistemas, el proceso dominante en altas energías de impacto. Se calculan espectros fotónicos de captura radiativa, considerando las transiciones entre distintas capas electrónicas, del proyectil y del blanco. Se compara la teoría con resultados experimentales, y se concluye que, ciertas estructuras que aparecen en los experimentos se explican satisfactoriamente en términos de transiciones a estados excitados del proyectil. En la sección 3.9 comparamos resultados teóricos con experimentales utilizando distintas aproximaciones para describir blancos multielectrónicos. Encontramos que existen grandes diferencias entre los distintos modelos a nivel de secciones eficaces diferenciales, aún cuando las secciones eficaces totales son similares.

El capítulo 4 trata sobre los procesos radiativos directos. Se obtiene el elemento de matriz del bremsstrahlung electrónico en la aproximación eikonal simétrica. Se compara la dispersión elástica radiativa con los resultados experimentales correspondientes a protones sobre láminas de aluminio. Se encuentra un buen acuerdo con los experimentos y con resultados teóricos previos, para los espectros fotónicos. También se presentan secciones eficaces diferenciales y totales para los



procesos de excitación y desexcitación radiativa. Se encuentra que el primero provee secciones eficaces pequeñas comparadas con las del proceso mecánico. El espectro asociado a la desexcitación produce la emisión continua alrededor de la línea característica, inducida por el paso del proyectil. Se muestran resultados de espectros, en donde se aprecia el llamado ensanchamiento por colisión.

## ABSTRACT

This thesis deals with the theory of continuum radiative emission coming from a colliding three-particle system, namely: a heavy projectile, a nucleus target and an active electron.

The general nonrelativistic formalism is developed in chapter 2. The matrix element of the radiation-matter interaction is calculated in first order perturbation theory using wave functions satisfying the mechanical Hamiltonian exactly. This matrix element is resolved in three terms representing the center of mass, the intersystem and the electron bremsstrahlung. At each step we impose the off-shell orthogonality property of the wave functions. The theory is developed taking into account the photon momentum, but the calculations are carried out using the dipole approximation. In this approximation, the center of mass does not radiate. The intersystem bremsstrahlung involves a more general concept than the internuclear bremsstrahlung used so far. The electron bremsstrahlung is computed using approximate wave functions of the distorted wave type.

Considering one active electron, the emitted radiation is identified as one of the following processes: radiative electron capture, radiative ionization, radiative elastic scattering, and radiative excitation and deexcitation.

Chapter 3 deals with radiative capture. The results

reaffirm that, at high impact energies, the radiative process is, for some systems, the dominant mechanism. Photon spectra are calculate considering state-to-state transitions. It is found that some structures occurring in the experiments can be explained in terms of transitions to excited states of the projectile. In section 3.9 we inspect the influence of approximate wave functions to describe multielectron targets. It is shown that there are significative differences at level of photon energy distribution, even though the corresponding  $A_{total}$  cross sections are quite similar.

We also study direct radiative processes in chapter 4. The electron bremsstrahlung term is calculated using the simetric eikonal approximation. Good agreement is obtained when compared with proton-aluminum experiments and previous theoretical results. Radiative excitation and deexcitation have also been calculated. The former is found to be very small, while the spectrum associated with the latter produces the continuous emission around the characteristic line. This emission is induced by the passing projectile, giving place to the so-called collisional broadening.

## LISTA DE ABREVIATURAS

AB	bremsstrahlung atómico	(Atomic Bremsstrahlung)
CB	ensanchamiento por colisión	(Collisional Broadening)
CBA	aproximación de Born Coulombiana	(Coulomb Born Approximation)
CDW	aproximación de onda distorsionada del continuo	(Continuum Distorted Wave)
CMB	bremsstrahlung del centro de masa	(Center of Mass Bremsstrahlung)
CTC	captura electrónica al continuo	(Capture to Continuum)
EB	bremsstrahlung electrónico	(Electron Bremsstrahlung)
IA	aproximación impulso	(Impulse Approximation)
ISB	bremsstrahlung entre sistemas	(Intersystem Bremsstrahlung)
MEC	captura electrónica mecánica	(Mechanical Electron Capture)
OBK	aproximación de Born sin interacción internuclear	(Oppenheimer-Brinkman-Kramers approximation)
REC	captura electrónica radiativa	(Radiative Electron Capture)
RECC	captura electrónica al continuo radiativa	(Radiative Electron Capture to Continuum)
REL	dispersión elástica radiativa	(Radiative ELastic scattering)
REX	excitación radiativa	(Radiative Excitation)
RHFCR	modelo de blanco multielectrónico de Roothaan-Hartree-Fock con coeficientes de Clementi-Roetti	

RI	ionización radiativa	(Radiative Ionization)
RR	recombinación radiativa	(Radiative Recombination)
SE	aproximación eikonal simétrica	(Simetric Eikonal)
SEB	bremsstrahlung de electrones secundarios	(Secondary Electron Bremsstrahlung)
SPB	aproximación de Born del potencial fuerte	(Strong Potential Born)

## 1 INTRODUCCION

En las colisiones de iones con átomos (o con iones) pueden activarse diversos canales, los que en general se clasifican de acuerdo al estado final de los electrones activos. Para simplificar el problema, consideremos una colisión entre un proyectil pesado y un átomo compuesto por un núcleo y un sólo electrón activo. Podemos entonces clasificar los procesos o canales de acuerdo al siguiente esquema:

Captura : es el canal de transferencia de carga, el electrón se captura en un estado ligado al proyectil.

Ionización: el electrón se transfiere al continuo.

Elástico : el electrón del blanco queda en el estado que tenía antes de la colisión, solamente se desvía el proyectil.

Excitación: el electrón sufre una transición inelástica a un estado ligado del blanco.

Para sistemas con más de un electrón se tienen todas las combinaciones posibles de los procesos anteriores, por ejemplo: dos electrones capturados, uno capturado y el otro excitado, etc.

En general, una transición se produce por la acción de los potenciales de interacción entre las partículas (transición mecánica), o por la interacción de dichas partículas con el campo de radiación (transición radiativa). Dominará el mecanismo radiativo o el mecánico dependiendo de la magnitud del elemento

de matriz correspondiente. Los dos mecanismos están siempre presentes, pero el mecánico suele ser más relevante, excepto en captura a altas energías, como veremos en la sección 3.10, en donde pasa a ser dominante el mecanismo radiativo.

En el Capítulo 2 desarrollamos el formalismo general. Comenzamos escribiendo el Hamiltoniano como suma del que corresponde al problema de dispersión mecánica (sin emisión de radiación), el del campo de radiación y el de interacción materia-radiación. Este último, en coordenadas relativas, puede escribirse como suma de tres términos que corresponden al bremsstrahlung del centro de masa (CMB), al bremsstrahlung entre sistemas (proyectil y blanco) (ISB) y al bremsstrahlung del electrón (EB). Este formalismo permite tratar la emisión de radiación de todos los canales en forma unificada. En la sección 2.2 deducimos la sección eficaz a primer orden en teoría de perturbaciones y, en la sección 2.3, hacemos la aproximación dipolar, con la cual obtuvimos todos los resultados mostrados en esta tesis. Para el rango de energías que trabajamos aquí, esta aproximación es válida.

Para transiciones de un electrón podemos clasificar los procesos radiativos de la siguiente manera:

- i) Captura electrónica radiativa (REC)
- ii) Ionización radiativa (RI)
- iii) Dispersión elástica radiativa (REL)
- iv) Excitación y Desexcitación radiativa (REX)

Esta clasificación es la adecuada para altas energías, en donde es conveniente una descripción con bases de estados atómicos. Por alta energía entendemos que la velocidad del ión incidente, sea mayor que la velocidad orbital de los electrones del blanco, es decir, que el tiempo de tránsito del proyectil por una región del tamaño del átomo sea menor que el período de revolución de los electrones en las órbitas de Bohr. En bajas energías, donde es más conveniente una descripción con bases moleculares, existe una clasificación paralela. Una revisión de este tema ha sido realizada por Anholt [1], quien presenta una clasificación de los procesos descritos con bases moleculares. En esta Tesis trabajamos con bases atómicas y en la hipótesis de onda distorsionada.

En el capítulo 3 se trata en detalle todo lo referente a REC. Este proceso es un intercambio de carga acompañado de emisión de radiación, e involucra al menos tres partículas (núcleo blanco, proyectil y electrón). Para altas velocidades de impacto del proyectil, REC se caracteriza por la presencia de un pico en la región de rayos x del espectro fotónico. Su perfil refleja la distribución de momento del estado inicial del electrón ligado al blanco. Este mecanismo de producción fotónica se midió por primera vez en 1972 [2]. Sin embargo, desde mucho antes se trabaja con la Recombinación Radiativa (RR) [3], que es una colisión entre dos partículas cargadas con emisión de radiación. Este proceso es el inverso del efecto fotoeléctrico;



el electrón inicialmente libre queda capturado en un estado ligado y se emite radiación. Para altas energías de colisión los valores de REC resultan íntimamente relacionados con RR. Una particularidad de la captura es que el mecanismo radiativo puede ser más importante que el mecánico. Se verá, además, que cuando ambos mecanismos dan la misma sección eficaz total, los cálculos predicen una sección eficaz diferencial hacia adelante, más grande para el proceso radiativo.

RI es un proceso en el cual la ionización del electrón se produce con emisión de radiación. Este proceso ha sido identificado experimentalmente en 1975 [4] y ya fue estudiado con modelos cuánticos de tres cuerpos [5] y con la teoría de encuentro binario [6]. Existe un caso particular de ionización que puede considerarse también como captura; aquel en el cual el electrón se eyecta con una velocidad muy próxima a la del proyectil en el estado final, en este sentido decimos que es capturado en el continuo del proyectil (CTC). Varios autores han estudiado la emisión de radiación en CTC [7,8], y han encontrado comportamientos análogos a REC. El tema de RI no será tratado en esta tesis en forma detallada. En la sección 3.11 sólo mostraremos como, del formalismo general que aquí se presenta, se obtienen algunos resultados conocidos.

El capítulo 4 trata sobre procesos directos, a saber: dispersión elástica radiativa (REL) y excitación y desexcitación radiativa (REX).

REL es un proceso radiativo en el cual el proyectil transfiere parte de su energía cinética al campo de radiación. Decimos "elástico" en el sentido que el electrón finaliza en el mismo estado atómico, pero debemos notar que el proceso global es inelástico, ya que se emite radiación debido a la deformación transitoria de la nube electrónica en presencia del proyectil. Este mecanismo de emisión fotónica es similar al bremsstrahlung atómico (AB) estudiado por Amusia [9], y recientemente desarrollado por Ishii y Morita [10,11].

REX es un proceso de excitación o desexcitación electrónica acompañado de emisión fotónica. En el primer caso el proyectil debe entregar una energía adicional al electrón, por lo que existirá un umbral para que la reacción ocurra. En la desexcitación se obtiene un ensanchamiento de la línea natural de decaimiento, debido a la presencia del proyectil. Este último mecanismo de emisión se conoce en Astrofísica como ensanchamiento por colisión (CB) [12,13].

En esta tesis se usan unidades atómicas (ver Apéndice I). A los efectos de una lectura rápida, se deriva a los apéndices las transformaciones de coordenadas y masas reducidas para el sistema de tres cuerpos (Apéndice II). En los Apéndices III a V se detallan cálculos de integrales de interés.

## CAPITULO 2

### FORMALISMO GENERAL

## 2.1 HAMILTONIANO DEL SISTEMA DE TRES CUERPOS

En este capítulo trataremos el problema de colisión de tres partículas con interacciones entre sí y con el campo de radiación. Usaremos siempre unidades atómicas salvo cuando se indique lo contrario. En el Apéndice I se detalla este sistema de unidades.

En la Figura 1 mostramos el sistema de 3 partículas. Los subíndices P, T y e simbolizan al proyectil, al blanco y al electrón activo respectivamente.  $M_p$ ,  $M_T$  y  $m$  son sus masas y  $\vec{x}_p$ ,  $\vec{x}_T$  y  $\vec{x}_e$  sus coordenadas desde algún sistema inercial.

El Hamiltoniano del sistema es

$$H = H_m + H_r + H_{mr} \quad (2.1)$$

donde  $H_m$  es el Hamiltoniano mecánico, es decir los operadores energía cinética de cada partícula y los potenciales de interacción,  $H_r$  es el Hamiltoniano del campo de radiación, y  $H_{mr}$  es el Hamiltoniano de interacción materia-radiación. Explícitamente están dados por las expresiones [14, 15]

$$H_m = \sum_{n=p,T,e} \frac{(-1)}{2 M_n} \nabla_{\vec{x}_n}^2 + V_T(|\vec{x}_e - \vec{x}_T|) + V_P(|\vec{x}_e - \vec{x}_P|) + V_N(|\vec{x}_P - \vec{x}_T|) \quad (2.2)$$

$$H_r = \sum_{\vec{k}, \lambda} \omega_{\vec{k}, \lambda} \cdot a_{\vec{k}, \lambda}^+ \cdot a_{\vec{k}, \lambda} \quad (2.3)$$

$$H_{mr} = -\frac{1}{ic} \sum_n \frac{z_n}{M_n} \bar{A}(\vec{x}_n) \vec{\nabla}_{\vec{x}_n} \quad (2.4)$$

donde  $\bar{A}(\vec{x}_n)$  es el potencial vectorial

$$\bar{A}(\vec{x}_n) = c \sum_{\vec{k}, \lambda} A_0 \hat{\lambda}(\vec{k}) \left[ a_{\vec{k}, \lambda} e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}_n} + a_{\vec{k}, \lambda}^* e^{-i \vec{k} \cdot \vec{x}_n} \right] \quad (2.5)$$

con  $A_0 = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}}$

$a_{\vec{k}, \lambda}^*$  y  $a_{\vec{k}, \lambda}$  : operadores de creación y destrucción.

$V_r, V_p$  y  $V_N$  : potenciales de interacción entre las partículas

$\omega$  : energía del fotón emitido

$z_n$  y  $M_n$  : carga y masa de las partículas,  $n=P, T$  ó  $e$

$\vec{k}$  : momento del fotón

$\hat{\lambda}(\vec{k})$  : versor de polarización del fotón

En la expresión de  $H_{mr}$  hemos omitido el término en  $A^2/c^2$  que produce transiciones de dos fotones, las cuales no serán tratadas en este trabajo.

Como  $H_m$  y  $H_r$  conmutan, tienen una base común que es el producto tensorial de sus autoestados. Considerando emisión espontánea, es decir transiciones de un fotón, el elemento de matriz de  $H_{mr}$  entre los autoestados  $|0_R\rangle$  y  $|1_k\rangle$  de  $H_r$  está dado por

$$H_{\ell} = \langle i_k | H_{mr} | 0_r \rangle = i A_0 \hat{\lambda}_{\ell} \sum_{n=T,P,C} \frac{z_n}{M_n} \cdot e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}_n} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}_n} \quad (2.6)$$

con  $\omega = k \cdot c$

Es más conveniente introducir el conjunto de coordenadas relativas  $\{ \vec{x}, \vec{R}_j, \vec{r}_j \}$  que diagonaliza la energía cinética. Estas coordenadas se muestran en la Figura 1. En el Apéndice II se expresan las relaciones con las coordenadas del Laboratorio, así como la transformación de los operadores impulso. En coordenadas relativas, el Hamiltoniano  $H_m$  y el elemento de matriz  $H_{\ell}$  quedan

$$H_m = -\frac{1}{2M} \nabla_{\vec{x}}^2 - \frac{1}{2\mu_j} \nabla_{\vec{R}_j}^2 - \frac{1}{2\mu_j} \nabla_{\vec{r}_j}^2 + V_T(|\vec{r}_T|) + V_P(|\vec{r}_P|) + V_N(|\vec{r}_N|) \quad (2.7)$$

$$H_{\ell j} = i A_0 e^{-i \vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{\lambda}_{\ell} \cdot \left[ a \vec{\nabla}_{\vec{x}} + B_j \vec{\nabla}_{\vec{R}_j} + b_j \vec{\nabla}_{\vec{r}_j} \right] \quad (2.8)$$

donde  $M=M_T+M_P+1$  es la masa total del sistema.  $\mu_j$ ,  $\mu_j$  son las correspondientes masas reducidas definidas en el Apéndice II,  $j = T, P$  ó  $N$  representa cualquier conjunto de coordenadas relativas,  $\{ \vec{r}_T, \vec{R}_T \}$ ,  $\{ \vec{r}_P, \vec{R}_P \}$  o  $\{ \vec{r}_N, \vec{R}_N \}$ . El primero, como veremos, es conveniente para analizar los procesos directos (coordenadas directas), el segundo para analizar procesos de intercambio de

carga (coordenadas reactivas) y el tercero para los fenómenos que provengan de la interacción internuclear (coordenadas internucleares). El factor  $\beta$  es el mismo para los tres conjuntos y está dado por

$$\beta = \frac{1}{M} (Z_T E_T + Z_P E_P - E_e) \quad (2.9)$$

donde

$$E_n = e^{i \vec{k} \cdot (\vec{x}_n - \vec{x})} \quad (2.10)$$

con  $n = T, P$  ó  $e$ . Para coordenadas directas, los factores  $B_T$  y  $b_T$  valen

$$B_T = \frac{Z_P E_P}{M_P} - \frac{Z_T E_T - E_e}{M_T + 1} \quad (2.11)$$

$$b_T = -E_e - \frac{Z_T E_T}{M_T} \quad (2.12)$$

Para coordenadas reactivas  $B_P$  y  $b_P$  toman el valor

$$B_P = -\frac{Z_T E_T}{M_T} + \frac{Z_P E_P - E_e}{M_P + 1} \quad (2.13)$$

$$b_P = -E_e - \frac{Z_P E_P}{M_P} \quad (2.14)$$

y para las coordenadas internucleares se tiene

$$B_N = \frac{Z_P E_P}{M_P} - \frac{Z_T E_T}{M_T} \quad (2.15)$$

$$b_N = -E_e - \frac{Z_P E_P + Z_T E_T}{M_P + M_T} \quad (2.16)$$

El elemento de matriz de interacción materia-radiación de la ecuación (2.8) tiene en cuenta todos los procesos radiativos que pueden ocurrir en un sistema de tres partículas, con emisión de un fotón, incluyendo los efectos de retardación [16,17], contenidos en las funciones  $E_n$ . En el caso en que estos efectos sean de importancia deberán ser tenidos en cuenta en las integraciones del elemento de matriz, para lo cual será mas conveniente escribir

$$\bar{x}_n - \bar{x} = Y_{nj} \bar{R}_j + y_{nj} \bar{r}_j \quad (2.17)$$

donde  $n=T,P,e$  indica de qué partícula se trata y  $j=T,P,N$  indica el conjunto de coordenadas usado. En particular tenemos

$$Y_{TT} = Y_{eT} = \frac{-\partial_T}{M_T + 1} \quad ; \quad Y_{TT} = 0$$

$$Y_{eT} = \mu_T \quad ; \quad Y_{TT} = -\frac{\mu_T}{M_T} \quad ; \quad Y_{PT} = \frac{\partial_T}{M_P} \quad (2.18)$$

y el resto puede ser calculado con la transformación usual del



## Apéndice II.

Además debemos notar que en las fórmulas dadas en esta sección no se ha realizado ninguna hipótesis sobre la relación de masas, es decir, lo hecho hasta ahora vale tanto para iones pesados como para partículas livianas.

## 2.2 SECCIONES EFICACES

En primer orden perturbativo la probabilidad de transición por unidad de tiempo está dada por la regla de oro de Fermi. Para perturbaciones que no dependen explícitamente del tiempo [18] se tiene

$$\dot{w}_{if} = 2\pi \rho_{ef} \sum_{\ell=1}^2 |\langle \psi_f | H_{\ell} | \psi_i \rangle|^2 \quad (2.19)$$

En este caso  $\psi_f$  y  $\psi_i$  son las autofunciones de  $H_m$ , es decir las funciones de onda exactas de la colisión mecánica. La suma sobre  $\ell$  tiene en cuenta los dos estados de polarización  $\hat{\lambda}_{\ell}$  del fotón. La densidad de estados finales es

$$\rho_{ef} = \left[ \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k}{d\omega d\Omega_{\omega}} \right] \left[ \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{d^3 K_{\ell}}{dE_{\ell} d\Omega} \right] \quad (2.20)$$

donde  $\omega$ ,  $k$  y  $d\Omega_{\omega}$  son la energía, el impulso y el ángulo sólido del fotón.  $E_{\ell}$ ,  $K_{\ell}$  y  $d\Omega$  son la energía, el impulso y el ángulo sólido de dispersión del proyectil o átomo reordenado en

el estado final.

Integrando sobre la energía final del proyectil y dividiendo por el flujo incidente se obtiene la sección eficaz quintuple diferencial

$$\frac{d^5\sigma}{d\omega d\Omega_\omega d\Omega} = \frac{\nu_r \nu_p \omega^2}{(2\pi)^4 c^3} \frac{K_f}{K_i} \sum_{\ell=1}^2 |\langle H_{\ell j} \rangle_{fi}|^2 \quad (2.21)$$

para procesos con reordenamiento. Si se trata de los canales directos debe reemplazarse el producto  $\nu_r \nu_p$  por  $\nu_r^2$

El elemento de matriz  $\langle H_{\ell j} \rangle_{fi}$  puede reescribirse como

$$\langle H_{\ell j} \rangle_{fi} = \frac{1}{(2\pi)^3} \langle e^{i\vec{U}_i \cdot \vec{x}} \psi_f^- | H_{\ell j} | e^{i\vec{U}_i \cdot \vec{x}} \psi_i^+ \rangle \quad (2.22)$$

donde las ondas planas representan el movimiento del centro de masa, con momento total  $\vec{U}_{i,f}$ . Las funciones de onda  $\psi_f^-$  y  $\psi_i^+$  son soluciones exactas del Hamiltoniano mecánico  $H_m$  sin el término de energía cinética del centro de masa.

### 2.3 APROXIMACION DIPOLAR

Podemos obtener un desarrollo multipolar expresando en serie las exponenciales que aparecen en las ecuaciones (2.9) a (2.16). Para longitudes de onda grandes de la radiación, (es decir  $k$  pequeños) el término mas importante es el dipolar, ésto

es, considerar  $|\vec{k} \cdot (\vec{r}_n - \vec{r})| \ll 1$  en las funciones (2.10). Como  $k = \omega/c$ , la velocidad de la luz en el denominador hace que la aproximación sea válida mientras la energía del fotón no sea muy alta [19]. En general puede decirse que la aproximación dipolar tiene validez para energías del fotón por debajo de la región de los rayos x duros [20]. Físicamente en la aproximación dipolar se considera al fotón con energía pero sin impulso, lo que conduce, además, a distribuciones angulares simétricas para la radiación emitida [21]. Discutiremos mejor este punto cuando se trate cada proceso en particular.

Los factores  $\beta$ ,  $B_j$  y  $b_j$  de la ecuación (2.8) se convierten en  $\beta_0$ ,  $B_{j0}$  y  $b_{j0}$ , los cuales se obtienen de las ecuaciones (2.9) a (2.16), reemplazando las exponenciales por la unidad. Además, para colisiones ión-átomo se tiene  $M_{r,v} \geq 1836 \gg 1$  y los factores  $b_{j0}$  son prácticamente unitarios.

El elemento de matriz de ecuación (2.22) puede descomponerse en tres términos de la siguiente manera:

$$\langle H_{\ell j} \rangle_{fi} = \delta(\bar{U}_i - \bar{U}_f - k) \left[ H_{\ell}^{cns} + H_{\ell j}^{iso} + H_{\ell j}^{eb} \right] \quad (2.23)$$

con

$$H_{\ell}^{cns} = i A_0 \beta_0 \hat{\lambda}_{\ell} \cdot \bar{U}_i \langle \psi_f^- | \psi_i^+ \rangle \quad (2.24)$$

$$H_{ij}^{iso} = i A_0 \partial_{j0} \hat{\lambda}_e \cdot \langle \psi_i^- | \vec{p}_{ej} | \psi_i^+ \rangle \quad (2.25)$$

$$H_{ij}^{eb} = -i A_0 b_{j0} \hat{\lambda}_e \cdot \langle \psi_i^- | \vec{p}_{ej} | \psi_i^+ \rangle \quad (2.26)$$

La función  $\delta$  lleva la información sobre la conservación del momento y puede ser eliminada en el formalismo de paquetes de onda [22,23], por lo que la omitiremos. La ecuación (2.23) es una extensión de la ecuación (4) de Shakeshaft y Spruch [24] a un sistema de tres partículas.

Como veremos en las secciones siguientes los tres términos de la ecuación (2.23) tienen significados físicos bien definidos.  $H_e^{cmb}$  representa la radiación del centro de masa,  $H_{ej}^{iso}$  es el bremsstrahlung entre sistemas P-(T+e) y  $H_{ej}^{eb}$  es el bremsstrahlung del electrón en ambos núcleos.

#### 2.4 RADIACION DEL CENTRO DE MASA

En el caso en que no se realice la aproximación dipolar, el término de radiación del centro de masa contribuye a la emisión de radiación, lo cual es razonable ya que  $\vec{U}_i - \vec{U}_f = \vec{R} \neq 0$ , es decir, el centro de masa está acelerado. Recientemente se ha demostrado que, cuando se consideran efectos de retardación, este término es el responsable de la restauración de la simetría angular en la captura radiativa a muy altas energías [23].

En la aproximación dipolar, en cambio, este término no debe contribuir. Esta conclusión proviene de observar la ecuación (2.24), en donde el producto escalar  $\langle \psi_i^- / \psi_i^+ \rangle$  vale cero para las funciones de onda exactas. Cuando se usan funciones de onda aproximadas que no son ortogonales, el término  $H_l^{cnb}$  no vale cero; en este caso decimos que la radiación es espuria, ya que proviene del hecho de que las funciones aproximadas no tienen las mismas propiedades que las exactas.

Es obvio que, de mantenerse este término, el resultado dependerá, aún en la aproximación dipolar, del sistema de referencia elegido ya que  $H_l^{cnb} \propto \bar{U}_i / M = \bar{v}_{cm}$ , donde  $\bar{v}_{cm}$  es la velocidad del centro de masa. Esto daría lugar a que el resultado no sea Galileano invariante, como mostraron Shakeshaft y Spruch [24] para el proceso de recombinación radiativa

En esta tesis trabajamos en general con funciones de onda aproximadas que son ortogonales, pero en aquel caso en que esto no sea posible 'invocaremos' esta propiedad; es decir, cambiamos las funciones de onda exactas por las aproximadas una vez que se ha eliminado el término  $H_l^{cnb}$

## 2.5 RADIACION ENTRE SISTEMAS

En esta sección probaremos, para procesos directos, que el segundo término  $H_{lj}^{isb}$  de la ecuación (2.23), que llamamos bremsstrahlung entre sistemas (ISB) está, en cierta forma,

relacionado con el bremsstrahlung internuclear [25]. Por razones que serán evidentes más adelante, usaremos las coordenadas directas  $(\vec{r}, \vec{R})$ .

Para este caso podemos extraer un factor de onda plana para el proyectil en la ecuación (2.25), con lo cual nos queda

$$\psi_i^+ = e^{i \vec{k}_i \cdot \vec{R}} \phi_i^+ \quad \psi_f^- = e^{i \vec{k}_f \cdot \vec{R}} \phi_f^- \quad (2.27)$$

donde  $\vec{k}_{i,f}$  son los impulsos inicial y final del proyectil y  $\phi_i^+$  y  $\phi_f^-$  son las funciones de onda exactas de  $H_m$ , excluyendo los operadores energía cinética del proyectil y del centro de masa.

Reemplazando las expresiones (2.27) en la ecuación (2.25) obtenemos

$$H_{\ell r}^{isb} = i A_0 B_0 \hat{\lambda}_\ell \left[ i \vec{k}_i \langle \psi_f^- | \psi_i^+ \rangle + \langle \phi_f^- | e^{i \vec{p} \cdot \vec{R}} \vec{\nabla}_{\vec{R}} | \phi_i^+ \rangle \right] \quad \dots (2.28)$$

donde  $\vec{p} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ . Si usamos la propiedad de ortogonalidad de las funciones de onda, la ecuación anterior nos queda

$$H_{\ell r}^{isb} = i A_0 B_0 \hat{\lambda}_\ell \cdot \langle \phi_f^- | e^{i \vec{p} \cdot \vec{R}} \vec{\nabla}_{\vec{R}} | \phi_i^+ \rangle \quad (2.29)$$

La ecuación (2.28) para  $H_{\ell r}^{isb}$ , nos muestra una situación similar a la descrita con respecto al término del centro de masa en la sección anterior. Si las funciones de onda aproximadas no son ortogonales, el primer término en (2.28) proveerá radiación espuria.

El factor  $B_{\nu} K_i$  es del orden de la velocidad, o sea, por lo menos del orden de la unidad en el rango en que trabajamos. Entonces, el término de radiación espuria será comparable con el de bremsstrahlung electrónico ( $H_{\ell T}^{sb}$ ). Si este término fuera incorrectamente involucrado en el cálculo, la emisión radiativa se vería afectada fuertemente por la masa nuclear del blanco, dando lugar a falsos efectos isotópicos [26].

Como veremos en la sección 4.3, es interesante observar que  $H_{\ell T}^{sb}$  es pequeño, del orden de  $1/M_T$ . El término de bremsstrahlung electrónico, en cambio, contiene el factor  $b_{jo}$ , que es del orden de la unidad. Entonces para procesos directos el  $H_{\ell T}^{sb}$  será despreciable frente al  $H_{\ell T}^{eb}$ . Es fácil ver que el ISB también es pequeño para REC. Estas consideraciones no son en general ciertas cuando la energía de la radiación crece, en la región de los rayos x duros el término de ISB puede ser el dominante, como ya mostraron Folkmann y col. [27].

Para analizar más en detalle el elemento de matriz del bremsstrahlung entre sistemas, son necesarias las funciones de onda exactas  $\phi_i^+$  y  $\phi_f^-$  que, como no las conocemos, las reemplazamos por funciones aproximadas. Elegimos funciones de onda calculadas en primera aproximación de Born, con el correcto comportamiento Coulombiano a grandes distancias, es decir agregamos funciones del continuo que provienen de la interacción Coulombiana internuclear. Esta aproximación se denomina aproximación de Born Coulombiana (CBA) [28] y las funciones de

onda estan dadas por

$$\phi_i^+ \approx \chi_i^+ = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_r} D^+(Z_\omega, \vec{k}_i, \vec{r}_r) \psi_i(\vec{r}_r) \quad (2.30)$$

$$\phi_f^- \approx \chi_f^- = e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_r} D^-(Z_\omega, \vec{k}_f, \vec{r}_r) \psi_f(\vec{r}_r) \quad (2.31)$$

$\psi_i(\vec{r}_r)$  y  $\psi_f(\vec{r}_r)$  son las funciones de onda inicial y final del electrón ligado al blanco, las funciones

$$D^\pm(Z, \vec{k}, \vec{r}) = e^{\pi\alpha/2} \Gamma(\pm i\alpha) {}_1F_1(\pm i\alpha, 1, \pm iKr - \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (2.32)$$

son las distorsiones coulombianas del continuo, donde  $\alpha = Z \frac{1}{K} = \frac{Z}{v}$ , con  $v = K/1$   $Z_\omega$  es el producto de las cargas de los sistemas P y (T+e) que colisionan, es decir  $Z_\omega = Z_p(Z_T+1)$  [29].

La aproximación propuesta tiene dos ventajas:

- i) las funciones aproximadas  $\chi_i^+$  y  $\chi_f^-$  son ortogonales, entonces no hay radiación espuria.
- ii) el movimiento del proyectil (coordenada  $\vec{r}_r$  en este caso) está desacoplado del movimiento electrónico ( $\vec{r}_r$ ), lo que simplifica notablemente las integrales.

Con estas funciones de onda el elemento de matriz queda

•



$$H_{\ell r}^{ISB} = iA_0 B_{T0} \langle \psi_f | \psi_i \rangle \hat{\lambda}_\ell \cdot \int d\vec{R}_r e^{i\vec{F} \cdot \vec{R}_r} D^{\pm}(Z_0, \vec{K}_i, \vec{R}_r) \times \vec{\nabla}_{\vec{R}_r} D^{\pm}(Z_0, \vec{K}_i, \vec{R}_r) \quad (2.33)$$

Observamos que en esta aproximación  $H_{\ell r}^{ISB}$  es proporcional al producto escalar entre los estados atómicos inicial y final del electrón ligado al blanco. Entonces, para procesos directos, sólo habrá contribución de ISB en el canal elástico, es decir que ISB contribuye en la dispersión elástica radiativa, pero no en la excitación ni en la ionización radiativas. De la ecuación anterior se ve además que, para REL, el elemento de matriz del bremsstrahlung entre sistemas solamente depende de la interacción del proyectil con el blanco, considerado éste como un todo. Físicamente significa que el proyectil emite radiación en presencia del blanco, siendo el electrón un simple observador. Recordemos que estas conclusiones se desprenden de la aproximación con que estamos tratando a las funciones de onda, de todos modos, en el rango de energías que trata este trabajo la aproximación de Born coulombiana es válida.

La integral en la ecuación (2.33) es una Integral de Nordsieck [30,31] y el resultado analítico se puede obtener en forma de funciones hipergeométricas  ${}_2F_1$ . En lugar de esto vamos a usar una forma más simple, desarrollada por Bethe y Salpeter [32] reteniendo el primer orden en  $Z_0$ . Puede demostrarse que, a primer orden, el resultado de Nordsieck conduce a la expresión (77.3) de la Ref. 32. En el Apéndice III se muestra, usando la

técnica de Bethe y Salpeter, el resultado de dos tipos de integrales de Nordsieck. Las expresiones encontradas son válidas además para cualquier clase de potenciales, mientras las de Nordsieck sólo valen para interacciones Coulombianas puras.

Reemplazando el elemento de matriz (2.33) calculado de esta forma en la sección eficaz quintuple diferencial, e integrando sobre la distribución angular del proyectil, se obtiene la siguiente sección eficaz triple diferencial, en energía y ángulo del fotón

$$\frac{d\sigma_T^{iso}}{d\omega d\Omega_\omega} = \frac{Z_N^2 B_{T0}^2}{\pi c^3 v^3 \omega} \left[ \sin^2 \Theta_\omega + (1 + \cos^2 \Theta_\omega) \left( \ln \frac{2 K_i}{\beta \cdot \frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (2.34)$$

donde  $\Theta_\omega$  es el ángulo de emisión respecto de la dirección de incidencia del proyectil.

Integrando sobre los ángulos de emisión del fotón, se obtiene el espectro fotónico integrado. El resultado es

$$\frac{d\sigma_T^{iso}}{d\omega} = \frac{16}{3} \frac{Z_N^2 B_{T0}^2}{c^3 v^3 \omega} \ln \frac{2 K_i}{\beta \cdot \frac{1}{2}} \quad (2.35)$$

El resultado anterior para el ISB es similar al Bremsstrahlung Internuclear (INB) de Alder y col. [25]. La única diferencia radica en el factor  $B_{T0} = Z_P/M_P - (Z_T-1)/M_T$ , que contiene a  $(Z_T-1)$  en lugar de  $Z_T$ . Esto se debe al sistema de coordenadas

$\{\bar{R}_i, \bar{R}_T\}$  elegido, ya que si se usan coordenadas reactivas  $\{\bar{R}_p, \bar{R}_T\}$  el factor será  $B_{p0} = Z_T/M_T - (Z_p - 1)/M_p$ , y si se usan las coordenadas internucleares  $\{\bar{R}_N, \bar{R}_N\}$  dicho factor será  $B_{p0} = Z_T/M_p - Z_T/M_T$ , que coincide con el resultado de Alder y col. Un aspecto interesante de este análisis es el hecho que el ISB se anule en diferentes relaciones carga/masa, dependiendo del sistema de coordenadas utilizado.

Finalmente, se debe notar que, aunque el ISB dependa del sistema de coordenadas usado, el término de EB debe depender del mismo; de tal manera que la suma sea independiente del sistema de coordenadas. Se discutirá con más detalle la relación entre el ISB y el EB en la sección 4.3.

## CAPITULO 3

### CAPTURA ELECTRONICA RADIATIVA

### 3.1 ASPECTOS GENERALES

Como ya dijimos, la captura electrónica radiativa (REC) es el proceso por el cual un electrón ligado al átomo blanco se captura en un estado ligado del proyectil, emitiéndose radiación. En REC tiene lugar entonces, una transición electrónica entre estados ligados de ambos centros, y los espectros de emisión manifiestan propiedades del blanco (en el ancho) y del proyectil (en la posición del pico).

Cuando la velocidad del ión incidente es muy grande, comparada con la velocidad orbital del electrón activo, REC puede asociarse con un proceso binario, llamado recombinación electrónica radiativa (RR). Este es un proceso en el cual participan sólo dos partículas: el electrón, inicialmente en un estado del continuo, queda capturado en un estado ligado del proyectil, emitiéndose radiación. Como puede verse, RR es el proceso inverso del efecto fotoeléctrico, y la sección eficaz se expresa de esta manera [3,33]. Los espectros asociados a RR son líneas con una energía bien definida, que dependen de las propiedades del proyectil y el electrón. Los deduciremos en la sección 3.3 juntamente con sus secciones eficaces totales. Luego veremos que, a nivel de secciones eficaces totales, RR y REC son equivalentes en altas energías. La Figura 2 muestra esquemáticamente ambos procesos.

Desde el punto de vista físico, es interesante ver que la captura electrónica no puede tener lugar si no participan por lo

menos tres partículas, o dos, si se crea una tercera en la colisión. En efecto, es fácil probar que en la colisión de dos partículas inicialmente libres, no se verifica la conservación de energía e impulso si se pretende tener una energía de ligadura negativa en el estado final. Es necesario incluir una tercer partícula que absorba energía e impulso para que el proceso ocurra. En el caso radiativo esta partícula es el fotón. De esta forma RR constituye el caso más simple de captura electrónica y no posee análogo mecánico (es decir captura, donde el operador relevante para la transición es el potencial de interacción partícula-partícula).

Con el nombre recombinación también se indica en astrofísica a procesos similares, que tienen lugar entre electrones y moléculas o iones multicargados. Detalles sobre este particular pueden verse en el artículo de revisión de Bates [34].

Los primeros cálculos detallados de secciones eficaces y distribución angular de RR fueron realizados por Stobbe [35], Stuckelberg y col. [36] y Wessel [37], y puede verse un resumen de ellos en el libro de Bethe y Salpeter [3]. En 1931 Sauter [38] presentó resultados de RR en la región relativista, un buen tratamiento de este tema se puede encontrar en el libro de Heitler [39]. La recombinación radiativa juega un papel importante en la investigación en Astrofísica [39] y Física de Plasmas [40], en donde las secciones eficaces son necesarias, por

ejemplo en el cálculo de coeficientes de transporte. Resultados de interés astrofísico, para el caso de hidrógeno, pueden verse en la tabla de Burgess [41]. En Física Atómica y Molecular y en Física del Sólido, REC resulta especialmente interesante, ya que puede usarse como test para analizar propiedades de los átomos y de los materiales. Por ejemplo, en las secciones 3.8 y 3.9 analizamos varios aspectos referidos a los espectros fotónicos de REC, los cuales brindan gran información sobre la estructura electrónica del blanco.

### 3.2 ANTECEDENTES

Los primeros en identificar REC experimentalmente fueron Schnopper y col. [2] en 1972. Esto fue una consecuencia de la evolución en los aceleradores de iones pesados, que permitió llegar a energías en las que el fenómeno es identificable. Schnopper y col. observaron espectros de radiación para diferentes proyectiles pesados y distintos blancos. Encontraron buen acuerdo de la posición del pico con la hipótesis de la existencia de una captura radiativa.

Un aspecto muy importante de REC (que en la sección 3.11 discutiremos con todo detalle) es que la sección eficaz total depende de  $v^{-5}$  y por encima de cierta energía, domina sobre la captura mecánica, que depende de  $v^{-12}$  [42]. Para blancos pesados la energía de "cruce" es muy alta. Raisbeck y Yiou [43], un año

antes que Schnopper, usando protones como proyectiles, presentaron resultados experimentales que muestran un cambio de pendiente en la sección eficaz total a muy alta energía y lo atribuyen, acertadamente, a que el mecanismo de captura radiativa es más importante que el mecánico. Al presente éstos son los únicos datos experimentales acerca de la competencia de estos dos mecanismos.

En 1973 Kienle y col.[44] presentaron espectros de radiación y analizaron los resultados experimentales con un modelo binario (RR), agregándole la distribución de impulso del electrón del blanco a través del llamado perfil de Compton. Puede decirse que éste es el primer modelo teórico de tres partículas para REC. Aunque acuerda con los experimentos, la explicación teórica no es enteramente satisfactoria porque se omitieron los estados de captura excitados. Como veremos en la sección 3.8, dichas transiciones explican ciertas estructuras del espectro fotónico.

Posteriormente, se realizaron varios experimentos con blancos sólidos [45-49] y gaseosos [2,44,50-52], y en las regiones de energías relativistas [53-56], y de bajas energías [57]. En esta región es mas apropiada una descripción molecular, denominada captura radiativa de orbitales moleculares (RECMO) [1]. Resulta interesante el caso en el cual la velocidad del ión incidente es mayor que la de los electrones externos del blanco, pero menor que la de los que pertenecen a las capas mas internas.



En este caso se tiene una buena descripción utilizando REC con orbitales atómicos, para la captura desde capas externas, y con orbitales moleculares para las capas internas [58,59].

En cuanto a los trabajos teóricos en REC, la secuencia puede resumirse así: en 1974 Briggs y Dettmann [60] proponen el primer modelo teórico de tres partículas en el tratamiento de parámetro de impacto. Estos autores confirman la validez del modelo de recombinación radiativa binario (RR), para velocidades muy altas del proyectil, aunque no relativistas. Más tarde, varios autores propusieron diferentes tratamientos (parámetro de impacto y método cuántico) y distintas aproximaciones (Born, CDW, IA, SPB) [61-68]. En la región de energías relativistas se ha trabajado con modelos binarios [38,69], pero no existe al presente un modelo relativista de tres partículas para REC. Si bien podría pensarse que éste no es necesario, ya que REC tiende a RR en alta energía, esto ocurre con las capas externas de los átomos, pero no con los electrones fuertemente ligados. En este caso resulta necesario, no sólo un tratamiento relativista para el proyectil, sino también para el electrón orbital. Actualmente se realizan trabajos experimentales con blancos muy pesados [70], y es de gran interés el tema de producción de vacancias de capa K [54]. Por todo esto, sería interesante contar con un modelo relativista de REC.

Para la distribución angular de la radiación dura [20] es importante el efecto del impulso del fotón. Este tema ha sido

estudiado desde el punto de vista experimental [71,72] y teórico [23], y no será tratado en esta Tesis.

Como las funciones de onda exactas del Hamiltoniano mecánico no se conocen, plantearemos las siguientes aproximaciones: primera aproximación de Born (OBK), aproximación impulso (IA), aproximación de onda distorsionada del continuo (CDW). Estas también se usan para resolver los elementos de matriz en el proceso de captura mecánica, y todas son aproximaciones de alta energía (mayor aún en el caso de Born). La elección de una u otra depende del tipo de problema a investigar. Por ejemplo, si queremos estudiar la sección eficaz con respecto al ángulo de salida del proyectil usaremos la CDW, que en el caso mecánico da muy buenos resultados [73,74], y no recurriremos a OBK [75]. Es decir, la aproximación se elige teniendo en cuenta su confiabilidad para explicar los datos experimentales mecánicos. De todos modos, debemos puntualizar que cuanto mejor es la aproximación, en general, mayor es el esfuerzo computacional que se debe realizar para obtener resultados, y en algunos casos no se justifica la magnitud del mismo. Por ejemplo, en la sección 3.8 investigaremos la estructura de los espectros de REC tratando de identificar solamente a que transiciones atómicas corresponden, entonces usaremos simplemente OBK e invertiremos mayor esfuerzo en describir todas las posibles transiciones. En la sección 3.9 mostraremos un ejemplo en donde la descripción del blanco es muy

importante, y por lo tanto, pondremos énfasis en describir el blanco con funciones de onda mas adecuadas (del tipo Hartree-Fock).

Finalmente digamos algo sobre la analogía que existe con las colisiones entre partículas con interacción gravitatoria. Shakeshaft y Spruch, en un artículo de revisión sobre procesos de intercambio de carga, sugieren la extensión de los resultados obtenidos clásicamente para colisiones con potenciales coulombianos, a los problemas con potenciales gravitatorios [76]. Por ejemplo, la captura de objetos masivos por estrellas. Esto sugiere, en el contexto de esta tesis, que los resultados de REC y RR también puedan generalizarse a la emisión de ondas gravitatorias. En principio, el formalismo que vamos a usar en este trabajo no se puede traducir directamente al problema gravitatorio reemplazando constantes, como se hace en Ref. 76, porque aquí hacemos un tratamiento cuántico. De todos modos, sería interesante realizar un tratamiento clásico, y comparar los resultados con los que se obtienen en física atómica, en relación a la dependencia con la energía, distribución angular y polarización. Por ejemplo, el primer término multipolar en la radiación gravitatoria es el cuadrupolar [77,78], mientras en REC es el dipolar, consecuencia esta de que las masas tengan el mismo signo. Por otra parte, como sabemos, cuando ambas interacciones compiten, el fenómeno gravitatorio es despreciable, pero son interesantes aquellos casos en donde la interacción

electromagnética vale cero, es decir gran parte de los problemas que involucran objetos astronómicos.

### 3.3 MODELO DE 2 CUERPOS

Como ya dijimos, la recombinación radiativa (RR) es la captura de un electrón del continuo a un estado ligado y ocurre sólo si se emite radiación. Para facilitar la comparación con REC, consideremos al electrón quieto en el sistema del Laboratorio, y al proyectil que incide con velocidad  $\vec{v}$ .

Siguiendo los mismos pasos que en las secciones 2.1 a 2.3 obtenemos que, el elemento de matriz del Hamiltoniano  $H_{mr}$  está dado por [24]

$$H_{\ell} = i A_0 e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}_2} \hat{\lambda}_{\ell} \left[ \mathcal{D} \vec{\nabla}_2 + b \vec{\nabla}_1 \right] \quad (3.1)$$

donde  $A_0$  y  $\hat{\lambda}_{\ell}$  tienen el mismo significado que antes,  $\vec{x}_2$  es ahora el centro de masa de las 2 partículas (e-P) y  $\vec{r}$  es su coordenada relativa. Convengamos en que todos los símbolos tienen el mismo significado que en las secciones precedentes, salvo que se indique lo contrario. Las funciones  $\mathcal{D}$  y  $b$  valen

$$\mathcal{D} = \frac{1}{M_2} \left[ Z_P e^{i \vec{k} \cdot \vec{r} / M_2} - e^{-i \vec{k} \cdot \vec{r} M_P / M_2} \right] \quad (3.2)$$

$$b = -\frac{Zr}{M_p} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}/M_2} - e^{-i \vec{k} \cdot \vec{r} M_p/M_2} \quad (3.3)$$

donde  $M_2 = M_p + 1$ .

El elemento de matriz entre los estados de scattering,

$$\psi_f^- = e^{i \vec{U}_f \cdot \vec{r}_2} \psi_f(\vec{r}) \quad ; \quad \psi_i^+ = e^{i \vec{U}_i \cdot \vec{r}_2} \psi_i(\vec{r}) \quad (3.4)$$

en la aproximación dipolar,  $k \approx 0$ , se escribe entonces

$$\langle H_e \rangle_{fi} = H_e^{cnb} + H_e^{eb} \quad (3.5)$$

donde

$$H_e^{cnb} = \frac{A_0}{M_2} \hat{\lambda}_e \cdot \vec{U}_i \langle \psi_f | \psi_i \rangle = 0 \quad (3.6)$$

$$H_e^{eb} = -i A_0 \hat{\lambda}_e \cdot \langle \psi_f | \vec{\nabla}_r | \psi_i \rangle \quad (3.7)$$

donde hemos usado la ortogonalidad de las funciones de onda,  $\langle \psi_f | \psi_i \rangle = 0$ , y además suponemos, como es usual, que  $M_{r,p} \gg m$ . Similarmente al caso anterior  $\langle H_e \rangle_{fi}$  es ahora la suma de dos términos: uno correspondiente al centro de masa y otro al gradiente de la coordenada relativa. El primer término es cero por la ortogonalidad de las funciones de onda y valen las mismas consideraciones realizadas en la sección 2.4 para el bremsstrahlung del centro de masa en el problema de tres cuerpos.

Para el potencial coulombiano la función de onda del estado inicial es

$$\psi_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \mathcal{D}^*(z_r, \vec{k}, \vec{r}) \quad (3.8)$$

donde la función  $\mathcal{D}^*$  está definida por la ecuación (2.32),  $z_r$  es la carga del ión y  $\vec{k}$  es el momento relativo proyectil-electrón. Para calcular el elemento de matriz (3.7) consideraremos un estado final  $i_s$  ligado al proyectil. De esta forma tenemos, para el elemento de matriz del operador impulso

$$\langle \psi_{i_s} | \vec{\nabla}_r | \psi_i(\vec{r}) \rangle = \int d\vec{r} \psi_{i_s}^*(\vec{r}) \vec{\nabla}_r \left[ e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \mathcal{D}^*(z_r, \vec{k}, \vec{r}) \right] \quad (3.9)$$

Esta integral tiene un resultado analítico [79]. De esta forma se obtiene, la sección eficaz diferencial, en la energía y el ángulo del fotón, calculada en forma exacta

$$\frac{d\sigma_2^{\text{exac}}}{d\omega d\Omega_\omega} = \frac{|N|^2 z^5 v z_r^5 \omega}{c^3 (v^2 + z_r^2)^4} \delta(\omega - \omega_2) \sin^2 \theta_\omega \quad (3.10)$$

con

$$\omega_2 = \frac{v^2}{2} - \epsilon_f = \frac{v^2}{2} + \frac{z_r^2}{2} \quad (3.11)$$

y

$$|N|^2 = \frac{2\pi\alpha(1+\alpha^2)}{1 - e^{-2\pi\alpha}} \cdot e^{-4\alpha \arctg(1/\alpha)} \quad (3.12)$$

donde el subíndice 2 indica que se trata del problema de dos cuerpos,  $\alpha = Z_p/v$  es el llamado parámetro coulombiano.

Nótese en la ecuación (3.10), que el espectro fotónico contiene una función  $\delta$  en términos de la energía del fotón. Esto expresa la conservación de la energía. Además, la distribución angular resulta ser la bien conocida  $\sin^2 \Theta_\omega$  [3].

Debido a la función  $\delta$  la integración de la sección eficaz simple diferencial de la ecuación (3.10) es inmediata y se obtiene

$$\sigma_2^{\text{EXAC}} = \sigma_2^{\text{BORN}} |N|^2 \quad (3.13)$$

con

$$\sigma_2^{\text{BORN}} = \frac{2^3 \pi}{3 c^3} \frac{\alpha^5}{(1+\alpha^2)^3} \quad (3.14)$$

donde el factor  $\sigma_2^{\text{BORN}}$  es la sección eficaz total, calculada en primera aproximación de Born [3]. Nótese que hasta aquí no hemos hecho ninguna aproximación en las funciones de onda para encontrar la expresión del elemento de matriz (3.7), solamente supusimos un determinado estado final (1s).

Para altas energías, es decir  $v \gg Z_p$ , se tiene  $\alpha \rightarrow 0$  y

$|N|^2 \rightarrow 1$ , con lo cual la sección eficaz total resulta

$$\sigma_2^{\text{EXAC}} \xrightarrow{\nu \gg Z_P} \sigma_2^{\text{BOER}} \xrightarrow{\nu \gg Z_P} \frac{2^3 \pi}{3} \frac{Z_P^5}{c^3 \nu^5} \tag{3.15}$$

En el rango de energías relativistas (digamos en principio  $\nu > c/2 = 68$ ), podemos usar el resultado que muestra Heitler [80]

$$\sigma_2^{\text{REL}} \approx \sigma^0 \left\{ 1 + \frac{3}{4} \frac{\gamma(\gamma-2)}{(\gamma+1)} \left[ 1 - \frac{c}{2 \nu \gamma^2} \ln \left( \frac{1+\nu/c}{1-\nu/c} \right) \right] \right\} \tag{3.16}$$

con

$$\sigma^0 = \frac{2^4 \pi}{3} \frac{Z_P^5 \nu \gamma^3}{c^4 (\gamma-1)^4 (\gamma+1)} \qquad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\nu}{c}\right)^2}} \tag{3.17}$$

la cual tiene como límite a  $\sigma_2^{\text{BOER}}$  cuando  $\gamma \rightarrow 1$ .

En la sección 3.11 usaremos estos resultados para comparar RR con REC y con la captura mecánica (MEC), y estudiaremos el rango de validez de cada modelo.

3.4 MODELO DE TRES CUERPOS

Como vimos en la sección 2.1 el elemento de matriz del Hamiltoniano materia-radiación es la suma de tres términos,  $H_{\ell}^{\text{CMB}}$ ,  $H_{\ell j}^{\text{ISO}}$  y  $H_{\ell j}^{\text{RB}}$ . Los dos primeros ya fueron discutidos en las secciones 2.4 y 2.5 y no serán tenidos en cuenta aquí. En lo que sigue vamos a trabajar con el término de bremsstrahlung



electrónico (EB), que es el que da la contribución mas relevante en el rango de energías del fotón que nos interesa.

La sección eficaz quintuple diferencial para el bremsstrahlung electrónico viene dada por las ecuaciones (2.21) y (2.26). Esta puede escribirse mas explícitamente teniendo en cuenta las proyecciones sobre los versores de polarización del fotón

$$\frac{d^5\sigma^{eo}}{d\omega d\Omega_\omega d\Omega} = \frac{\lambda_r \lambda_e \omega^2}{(2\pi)^4 c^3} \frac{K_f}{K_i} \left[ |H_{1f}^{eo}|^2 + |H_{2f}^{eo}|^2 \right] \quad (3.18)$$

en donde  $K_f/K_i \approx 1$  para las energías que trabajamos aquí. El elemento de matriz de EB para captura es

$$H_{\ell f}^{eo} = -i A_0 \hat{\lambda}_\ell \cdot \langle \psi_f^- | \vec{\nabla}_\ell | \psi_i^+ \rangle \quad (3.19)$$

donde las funciones  $\psi_f^-$  y  $\psi_i^+$  son las funciones de onda exactas de  $H_m$  sin el operador energía cinética del centro de masa. Se ha elegido el conjunto de coordenadas  $\{\vec{r}, \vec{R}_r\}$  que, en intercambio de carga, facilita los cálculos. En la ecuación (3.19) se consideró  $b_{f_0} \sim 1$ , ya que  $M_{r,r} \gg m$  (ver ecuación 2.13)

Como ya dijimos, para REC usaremos funciones de onda aproximadas OBK [42], IA [81] y CDW [74,82]. Estas aproximaciones se construyen con las siguientes funciones de onda

inicial y final

$$\phi_i^0 = e^{i \bar{k}_i \cdot \bar{R}_r} \psi_i(\bar{r}_r) \quad \xi_f^0 = e^{i \bar{k}_f \cdot \bar{R}_r} \psi_f(\bar{r}_r) \quad (3.20)$$

$$\phi_i^{\pi} = \phi_i^0 \mathcal{D}^*(Z_r, -\bar{v}_i, \bar{r}_r) \quad \xi_f^{\pi} = \xi_f^0 \mathcal{D}^*(Z_r, \bar{v}_f, \bar{r}_r) \quad (3.21)$$

$$\phi_i^{\pi} = \int \frac{d\bar{q}}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}_i(\bar{q}) e^{i(\mu, \bar{k}_i + \bar{q}) \cdot \bar{R}_r} e^{i(\bar{q} - \bar{v}_i) \cdot \bar{r}_r} \mathcal{D}^*(Z_r, \bar{q} - \bar{v}_i, \bar{r}_r) \quad (3.22)$$

donde el tilde indica la transformación de Fourier,  $\psi_i(\bar{r}_r)$  y  $\psi_f(\bar{r}_r)$  son los estados electrónicos en cada centro y  $\mathcal{D}^{\pi}$  viene dado por la ecuación (2.32).

Con las ecuaciones anteriores tenemos, para las funciones de onda aproximadas del Hamiltoniano mecánico

$$\begin{aligned} \text{Born: } \psi_i^+ &\approx \phi_i^0 & \psi_f^- &\approx \xi_f^0 \\ \text{CDW: } \psi_i^+ &\approx \phi_i^{\pi} & \psi_f^- &\approx \xi_f^{\pi} \\ \text{IA: } \psi_i^+ &\approx \phi_i^{\pi} & \psi_f^- &\approx \xi_f^0 \end{aligned} \quad (3.23)$$

En las secciones 3.5 a 3.7 calcularemos explícitamente el elemento de matriz del operador  $\bar{V}_{\bar{r}_r}$  con estas aproximaciones.

## 3.5 APROXIMACION DE BORN (OBK)

Usaremos la primera aproximación de Born sin tener en cuenta el potencial internuclear, cuyas funciones de onda están dadas por (3.20) y (3.23). El elemento de matriz del bremsstrahlung electrónico queda

$$\begin{aligned}
 H_{ep}^{eo} &= i \hat{\lambda}_e \int d\vec{r}_e d\vec{R}_e e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_e} \psi_f^*(\vec{r}_e) \vec{\nabla}_e \left( e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_e} \psi_i(\vec{r}_e) \right) = \\
 &= \hat{\lambda}_e \vec{W}_T \tilde{\psi}_i(\vec{W}_T) \tilde{\psi}_f^*(\vec{W}_T)
 \end{aligned} \quad (3.24)$$

$\vec{K}_i$  es el momento inicial del proyectil,  $\vec{K}_f$  es el momento final del átomo reordenado,  $\vec{W}_T$  y  $\vec{W}_P$  son los momentos transferidos dados por

$$\begin{aligned}
 \vec{W}_T &= \vec{K}_f - \mu_T \vec{K}_i \approx \vec{\eta} + W_{T2} \hat{v} \\
 \vec{W}_P &= \vec{K}_i - \mu_P \vec{K}_f \approx \vec{\eta} + W_{P2} \hat{v}
 \end{aligned} \quad (3.25)$$

con

$$\begin{aligned}
 \vec{\eta} &= K_i \sin \theta [\cos \varphi, \sin \varphi, 0] \\
 W_{T2} = \vec{W}_T \cdot \hat{v} &= \frac{v}{2} - \frac{\omega + \epsilon_i - \epsilon_f}{v} \\
 W_{P2} = \vec{W}_P \cdot \hat{v} &= \frac{v}{2} + \frac{\omega + \epsilon_i - \epsilon_f}{v}
 \end{aligned} \quad (3.26)$$

donde hemos usado la conservación de la energía:

$$\frac{K_i^2}{2\gamma_r} + \epsilon_i = \frac{K_f^2}{2\gamma_p} + \epsilon_f + \omega \quad (3.27)$$

Además,  $\gamma_{r,p}$  son las masas reducidas definidas en el Apéndice II.

La sección eficaz diferencial queda entonces

$$\frac{d^5\sigma_{\text{REC}}}{d\omega d\Omega_\omega d\Omega} = \frac{\omega \gamma_r \gamma_p}{(2\pi)^3 c^3} |\tilde{\psi}_i(\vec{w}_r) \tilde{\psi}_f^*(\vec{w}_p)|^2 \left[ |\hat{\lambda}_1 \cdot \vec{w}_r|^2 + |\hat{\lambda}_2 \cdot \vec{w}_r|^2 \right] \quad \dots (3.28)$$

El espectro de rayos x viene dado por la expresión anterior integrada en todos los ángulos del proyectil  $d\Omega$ , lo cual será tratado en detalle en la sección 3.8. En la ecuación anterior podemos ver que el espectro de REC está determinado por las funciones de onda del electrón ligado al proyectil y al blanco. Además, dado que las transformadas de Fourier de los estados  $i$  son Lorentzianas, podemos ver de la expresión anterior que el espectro tendrá dos máximos, cuando los módulos de  $\vec{w}_r$  y  $\vec{w}_p$  sean mínimos. Como veremos en la sección 3.11, el proyectil se dispersa principalmente hacia adelante, entonces, la posición de los máximos se obtiene al anular  $w_{rx}$  y  $w_{px}$ . Por lo tanto, los máximos tienen una posición aproximadamente igual a

$$\omega_+ = \frac{v^2}{2} + \epsilon_i - \epsilon_f \quad (W_{rz} = 0) \quad (3.29)$$

$$\omega_- = -\frac{v^2}{2} - \epsilon_i + \epsilon_f \quad (W_{rz} = 0) \quad (3.30)$$

y un ancho dado por  $2v\sqrt{|\epsilon_i|}$ .

En la hipótesis de alta energía, o sea  $v \gg \epsilon_{i,f}$ , vemos que uno de los máximos está en el rango de emisión ( $\omega_+ > 0$ ) y el otro en el de absorción ( $\omega_- < 0$ ).

Por último, nótese que la posición del pico en REC, ecuación (3.29), difiere de la del proceso binario RR, ecuación (3.11), en la energía de ligadura inicial  $\epsilon_i$ .

### 3.6 APROXIMACION DE ONDA DISTORSIONADA DEL CONTINUO

Como ya vimos, esta aproximación consiste en considerar  $\psi_i^+ \approx \phi_i^{\pi}$  y  $\psi_f^- \approx \xi_f^{\pi}$ , dadas por las ecuaciones (3.21). Para transiciones  $1s-1s$  se tiene

$$\langle \xi_f^{\pi} | \nabla_r | \phi_i^{\pi} \rangle = -i F_r F_r \tilde{\phi}_i(\vec{w}_r) \tilde{\phi}_f^*(\vec{w}_r) (I \vec{v} - J \vec{w}_r) \quad (3.31)$$

con

$$I = (1 - i a_r)(1 - i a_r) + \frac{a_r}{A_r} (1 - i a_r) \left[ 2i + \frac{v}{\gamma_r} \right] - \frac{a_r a_r}{A_r A_r} \left[ 1 - i \frac{v}{\gamma_r} \right]$$

$$J = \left[ 1 - i a + i \frac{a_r}{A_r} \right] \left[ 1 - i a_r + i \frac{a_r}{A_r} \right] - \frac{a_r a_r}{A_r A_r} \cdot \frac{v^2}{\gamma_r \gamma_r} \quad (3.32)$$

y  $a_j = Z_j / v$ ,  $j = T \text{ ó } P$ , donde  $Z_j$  es la carga nuclear.  $g_T$  y  $g_P$  son las cargas efectivas de los orbitales  $1s$  en el blanco y el proyectil respectivamente. Además

$$F_j = e^{-\pi a_j / 2} r (1 - i a_j) A_j^{-i a_j}$$

(3.33)

$$A_j = \frac{(\bar{W}_j - \bar{v})^2 + (Z_j - i v)^2}{W_j^2 + Z_j^2}$$

Luego usaremos la sección eficaz en CDW, de acuerdo a estas expresiones, para comparar la captura radiativa con la mecánica.

### 3.7 APROXIMACION IMPULSO

Esta aproximación consiste en reemplazar la función exacta inicial por  $\phi_i^x$  y la final por  $\chi_f^2$ , cuyas expresiones están dadas por las ecuaciones (3.22) y (3.20), respectivamente. En esta aproximación el elemento de matriz se escribe

$$\int d\bar{q} \delta(\bar{q} - \bar{w}_T) \tilde{\psi}_i(\bar{q}) \int d\bar{r}_P \psi_f^*(\bar{r}_P) \bar{\nabla}_P \left[ e^{i(\bar{q} - \bar{v}) \cdot \bar{r}_P} D^*(Z_P, \bar{q} - \bar{v}_i, \bar{r}_P) \right]$$

... (3.34)

La integral en  $\bar{r}_P$  es la misma que en el caso de recombinación radiativa (ecuación (3.9)), o sea representa un elemento de

matriz de 2 cuerpos con una velocidad relativa igual a  $\vec{W}_p = \vec{v}_i - \vec{W}_r$ . Para transiciones que finalizan en el estado 1s la ecuación anterior puede también escribirse como

$$\langle \xi_f^2 | \vec{V}_r | \phi_i^1 \rangle = \vec{W}_p e^{-\pi c_r/2} r(1+ic_r) A^{-ic_r} (1-ic_r) \tilde{\psi}_i(\vec{W}_r) \tilde{\psi}_f^*(\vec{W}_p)$$

... (3.35)

donde

$$c_r = \frac{Z_p}{W_p} \quad ; \quad A = -\frac{(W_p + iZ_p)^2}{W_p^2 + Z_p^2} \quad (3.36)$$

En la sección 3.9 usaremos estas expresiones para calcular espectros fotónicos de REC, aproximando la función de onda de los electrones del blanco con varios modelos.

### 3.8 ESPECTROS FOTONICOS EN LA PRIMERA APROXIMACION DE BORN

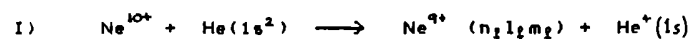
El espectro fotónico, esto es la sección eficaz diferencial en energía y en ángulo sólido del fotón, se expresa por

$$\frac{d^3\sigma}{d\omega d\Omega_\omega} = \int d\Omega \left( \frac{d^5\sigma}{d\omega d\Omega_\omega d\Omega} \right)$$

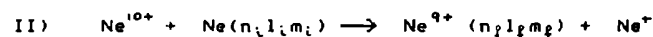
El integrando de la expresión anterior es la ecuación (3.28), que tiene una dependencia complicada con el ángulo de salida del

proyectil, por lo que esta integración se realizó numéricamente.

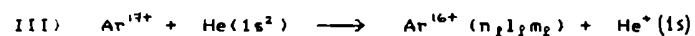
En las Figuras 3 a 5 comparamos los resultados teóricos obtenidos con la primera aproximación de Born, con los resultados experimentales de Kienle y col. [44]. Consideramos tres sistemas distintos:



a 140 Mev de energía incidente ( $v=16.7$  u.a.)



a 140 Mev de energía incidente ( $v=16.7$  u.a.)



a 288 Mev de energía incidente ( $v=17$  u.a.)

Para describir los estados atómicos usamos funciones de onda de Roothaan-Hartree-Fock con coeficientes y cargas de Clementi-Roetti (RHFCR) [83]. En la sección 3.9 veremos que estas funciones de onda son las mejores para describir espectros fotónicos de REC. En la ecuación (3.28) es necesario conocer las transformadas de Fourier de los estados atómicos, para lo cual hemos usado las formulas de Flannery [84].

En la Figura 3a se muestran los espectros teóricos a  $90^\circ$  con respecto al haz incidente, para las transiciones electrónicas del caso I:  $K \rightarrow K(1s-1s)$ ,  $K \rightarrow L(1s-2s, 1s-2p_{0,\pm 1})$ , y  $K \rightarrow M(1s-3s, 1s-3p_{0,\pm 1}, 1s-3d_{0,\pm 1,\pm 2})$ . Primero se observa que la



principal contribución está dada por la transición a la capa K del proyectil. Además las posiciones del máximo varían con  $E_p$ . La Figura 3b muestra en línea llena la suma de estas tres contribuciones, los puntos son los resultados experimentales de Kienle y col. y en línea de puntos el resultado teórico de estos autores.

El máximo de la izquierda podemos atribuirlo a los distintos estados excitados del proyectil. En este trabajo no hemos tenido en cuenta estados mas altos que el M, pero si estos se agregaran se tendrían correcciones hacia las bajas energías. Para ilustrar ésto se incluyó en la Figura 3 la transición del electrón al continuo del proyectil (RECC), según el cálculo de Martiarena y col. [8]. Mas adelante, en la sección 3.12, tratamos brevemente RECC y mostramos la sección eficaz diferencial obtenida en Ref. 8.

Para el caso II), ver figura 4, se han tenido en cuenta las transiciones  $K \rightarrow K, L, M$  y  $L \rightarrow K, L, M$ . El esfuerzo computacional en este caso ha sido muy grande, tomó alrededor de 10 horas de cpu en el equipo PDP 11/44 del IAFE. El acuerdo con los experimentos en este caso es muy bueno. Nótese el corrimiento del flanco izquierdo de la gráfica, el cual proviene de considerar las transiciones  $L \rightarrow L$  y  $L \rightarrow M$ . Nótese que la principal contribución la provee la captura desde la capa L, que es la menos ligada al blanco. Y no la capa K, que sólo contribuye a ensanchar la campana. Se puede ver en la Figura 4a la influencia de la transformada de Fourier de los estados

electrónicos del blanco; los picos provenientes de los estados  $s$  son mas anchos que los  $p$ . Finalmente observamos que REC no explica la cola del espectro en la región de mas alta energía del fotón. Kienle y col atribuyeron este fenómeno a un proceso de Bremsstrahlung de los electrones mas ligados.

En la Figura 5a mostramos la contribución de los espectros correspondientes al caso III. Consideramos el ión de Argón con carga 17 [85]. En este caso las contribuciones de  $K \rightarrow L, M$  están bien separadas de la  $K \rightarrow K$ , ésto se debe a que la energía de ligadura  $E_i = -Z_p^2/2 \cdot n^2$  es muy alta en este caso, y el decrecimiento con el numero cuántico al cuadrado es notable. En la Figura 5b se muestra la suma de las contribuciones. Se explica bien el pico  $K \rightarrow K$  pero para las otras transiciones los máximos están enmascarados por las líneas de decaimiento  $K_{\alpha}$  y  $K_{\beta}$  del ión de Ar.

Al pasar de las Figuras a) a las b) se han hecho dos correcciones, una normalización y un desplazamiento en la posición del máximo. La normalización proviene de que Kienle y col. expresan en su artículo [44] que han normalizado los resultados, pero no dicen cual es el factor. De todos modos aquí estamos interesados en la estructura de los espectros, entonces la normalización carece de importancia.

Es conocida la influencia del corrimiento Doppler en los espectros de REC [23,56,72], pero ésta no es la explicación para el desplazamiento, porque a  $90^\circ$  esta corrección vale cero. No tenemos una respuesta precisa para explicar el corrimiento

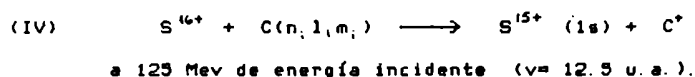
observado, que resulto ser del orden de 0.5 Kev. Posiblemente este desplazamiento corresponda a una pérdida de energía del haz al atravesar las ventanas de la cámara, con lo cual la energía "verdadera" de los proyectiles no sería la que se cita en el trabajo experimental, y que usamos aquí, sino algo menor. Por ejemplo, el frenamiento de iones de Ne a 140 Mev en la lámina de  $6\frac{1}{2}\mu\text{m}$  de Al, usada en la experiencia, es aproximadamente del 7%. Si con la energía de impacto corregida de esta forma, se usa la expresión (3.29) para la posición del pico, se obtiene un desplazamiento de 0.2 Kev.

Otro parámetro que puede afectar la posición del máximo es la carga del proyectil. En el trabajo de Kienle y col. se dice que la carga del Neón está bastante bien definida en 10, pero ésta no es una carga medida [85,86], y puede existir una proporción de iones de carga mas baja. Suponiendo que esto sea así, con  $\text{Ne}^{9+}$  el pico de REC se corre en 0.3 Kev, que junto con el frenamiento, explicaría el corrimiento observado. Si se contara con datos mas precisos acerca de la experiencia, podría hacerse un ajuste con el modelo teórico, teniendo en cuenta los distintos estados de carga con su abundancia relativa [86,87].

En síntesis, se muestra aquí que el espectro fotónico presenta varias estructuras, y que estas provienen de la captura electrónica radiativa a estados excitados del proyectil.

## 3.9 INFLUENCIA DE LA DESCRIPCION DEL BLANCO EN LOS ESPECTROS

En esta sección estudiaremos la variación del espectro de REC, cuando se usan diferentes descripciones aproximadas para la función de onda correspondiente a los electrones del átomo blanco. Para ejemplificar consideraremos la colisión



Para este proceso hay medidos espectros fotónicos, y resultados teóricos previos en el trabajo de Jakubassa y col. [65] (en esta sección referido como I). Estos autores remarcan la coincidencia de los resultados experimentales con los obtenidos con el modelo de REC en la IA y en la aproximación de Born de potencial fuerte (SPB), en contraste con las predicciones de Gorriz y col. [64] (ver Figura 6a). La SPB es una aproximación para las funciones de onda del Hamiltoniano mecánico  $H_m$ , que considera sólo las interacciones mas fuertes en el desarrollo perturbativo de la matriz  $T$  [88,89].

Gorriz y col. afirman que la SPB da secciones eficaces totales que difieren, para la colisión IV, en un orden de magnitud con la IA y con el resultado que se obtiene con el modelo binario de recombinación radiativa. En principio, y de ser correcto, el resultado de Gorriz y col. traería serias dificultades en cuanto al límite asintótico de REC.

Los experimentos de I se realizaron bombardeando láminas de

Carbono con iones de Azufre a 125 Mev producidos en un acelerador tipo Tandem. Como es sabido, los iones del haz no poseen todos el mismo estado de carga, sino que existe una mezcla. Esta indeterminación no es una dificultad grave para reconocer los picos de REC, ya que como vimos en la sección anterior, éstos están caracterizados por la energía de ligadura final. Por ejemplo, en I se distinguen claramente los espectros experimentales correspondientes a los iones  $S^{15+}$  y  $S^{16+}$ .

Nótese que el  $S^{16+}$  es un ión desnudo, entonces el estado ligado final está descrito exactamente con funciones de onda hidrógenicas.

Por el contrario, el blanco es un átomo (carbono neutro) con varios electrones, y debe ser descrito en forma aproximada. En I se dice que para describir los electrones del Carbono se utilizaron funciones de onda hidrógenicas, con cargas efectivas 5.62 para la capa interna y 1.78 para la capa de valencia (los 4 electrones de capa L). Además se indica en I que, estos valores provienen de ajustar los perfiles de Compton experimentales con funciones de Hartree-Fock, asumiendo simetría esférica de la distribución de electrones.

En esta sección mostraremos espectros de REC obtenidos todos con la aproximación impulso (IA), y con cuatro descripciones distintas de los estados electrónicos del blanco, a saber:

- 1) En la Figura 6a, según el resultado de I.
- 2) En la Figura 6b, cargas efectivas que satisfacen las correctas energías de ligadura, 4.77, 2.43 y 1.58 para los orbitales 1s, 2s, y 2p respectivamente, los cuales se describen con funciones hidrógenicas puras.
- 3) En la Figura 6c, con funciones de onda Rothaann-Hartree-Fock según Clementi y Roetti (RHFCR) [83], con la configuración global 1S. Se obtuvieron resultados muy similares usando una configuración global 3P.
- 4) En la Figura 6d, con funciones de onda hidrogénicas tipo 1s para todos los electrones, con cargas efectivas 5.62, y 1.78 para los electrones de la capa interna y para los de valencia

En todos los casos, y al igual que en I, consideramos emisión a  $90^\circ$  respecto del haz incidente. En todas las figuras se muestran los resultados experimentales, y la contribución de cada capa separadamente, y en línea llena las contribuciones sumadas.

En ningún caso se han renormalizado ni corrido los espectros ya que aquí lo que nos interesa mostrar son las diferencias entre cada descripción de blanco. Estas diferencias quedarían disminuídas si aplicamos factores de normalización.

Como vemos de las Figuras 6c y 6d, los resultados para electrones capturados de la capa interna son prácticamente los mismos en todos los modelos de blanco, y tampoco varían mucho con la carga efectiva. Los resultados conflictivos son los

provenientes de la capa de valencia, que es la que provee la principal contribución al espectro.

En la Figura 6b vemos que los orbitales hidrogénicos sobrevalúan la contribución de la capa de valencia a la sección eficaz. Además, para estos estados, el resultado es muy sensible a la carga efectiva que se utilice [90].

Con las funciones RHFCR se probaron dos conjuntos de coeficientes y cargas de las funciones Z-múltiples, los que describen una configuración global 1S y los que describen una 3P. Se ha encontrado que la diferencia entre uno y otro es completamente despreciable. En la Figura 6c) observamos que ésta es la descripción que mejor acuerda con los experimentos y es el resultado que consideramos mas genuino. Aquí no hay suposiciones "externas al modelo", acerca de las cargas efectivas.

El resultado mostrado en la Figura 6d) es sorprendente porque acuerda bastante bien con los experimentos donde esperaríamos que no suceda así. En este caso estamos describiendo todos los electrones del blanco con funciones tipo 1s, lo cual no es correcto, y usamos las cargas efectivas 5.62 y 1.78 de I. Cabe preguntarse por qué en este caso particular una descripción tan poco precisa conduce a un resultado bueno, lo que nos quedara como interrogante. El hecho de que los resultados con RHFCR para configuraciones 1S y 3P sea el mismo, elimina la posibilidad de pensar en una explicación que involucre al estado global del átomo.

Es interesante ver que, a pesar de que se tienen diferencias apreciables en los espectros, las distintas formas de describir el blanco conducen a resultados muy similares para las secciones eficaces totales. La tabla siguiente muestra los resultados de las secciones eficaces integradas que obtuvimos con las formas 2) a 4) para electrones capturados desde la capa interna o desde la capa de valencia. Además se muestran los resultados teóricos y experimentales previos, todos expresados en barn/sr.

		C(1s)	C(2s,2p)	Total
IA	Ref. 65	36	90	126
SPB	Ref. 65	48	94	142
SPB	Ref. 64	290	725	1015
RR	Ref. 65	46	93	139
IA	Forma 2	36	72	108
IA	Forma 3	38	71	109
IA	Forma 4	36	90	126
Experimental Ref. 65		-	-	120 ± 30

Salvo la SPB de Gorriz y col., todos los resultados de las secciones eficaces totales están de acuerdo con los experimentales. Notamos que el resultado obtenido con la descripción 4) del blanco es el que coincide con el de I. Existe



además coincidencia entre las secciones eficaces totales en las descripciones RHFCR 3) con la descripción hidrógenica 2), aún cuando los espectros difieren considerablemente. El resultado con el modelo binario RR es razonablemente más grande, ya que se considera que los electrones no están ligados en el estado inicial (recuérdese que RR da una función como espectro fotónico).

Entonces, puede decirse que si lo que interesa es el espectro fotónico, éste deberá ser obtenido con las mejores funciones de onda del blanco. Pero para calcular las secciones eficaces totales es posible usar la descripción hidrógenica con las cargas que corresponden a la correcta energía de ligadura. Esta conclusión no debería ser extendida a la descripción con funciones tipo 1s, por lo menos hasta que sean analizados varios sistemas distintos.

Es interesante discutir los resultados calculados en la SPB. Esencialmente los cálculos de Gorriz y col. y de Jakubassa y col. son los mismos. El resultado tan disímil proviene de que en I se "renormalizaron" las funciones de onda SPB, de modo tal que la sección eficaz total de REC para  $Z_T \rightarrow 0$  coincida con la que se obtiene en el modelo de 2 cuerpos (RR). El factor de "normalización" que encontraron en I es

$$N_0 = e^{\pi Z_T/2v} \Gamma(1+iZ_T/v) \quad (3.37)$$

Pero éste es justamente el factor de Coulomb y es un problema genuino de la aproximación SPB, ya sea, debido al largo rango del potencial Coulombiano, o a la contribución de los estados fuera de la capa de energía [89,91-93].

En I se subraya la coincidencia, normalización mediante, entre los dos modelos teóricos con los experimentos, y de esta manera el tema aparentemente queda cerrado.

Nosotros no estamos de acuerdo con esto y pensamos que no es lícito eliminar el problema contenido en la SPB de esta forma, sino que habría que replantear con cuidado el uso de esta aproximación.

Gorriz y col. predicen, para cualquier colisión, una relación entre las secciones eficaces totales de captura radiativa calculadas en la SPB y la IA dada por la ecuación

$$\frac{\sigma^{SPB}}{\sigma^{IA}} \approx 2\pi \frac{Z_p}{v} \quad (3.38)$$

Para el caso particular de la colisión IV este cociente vale 8.

Volviendo a la descripción de los electrones del blanco, podemos concluir que, para explicar la forma del espectro, es necesario un adecuado modelo del blanco. En general ocurre en colisiones atómicas que se centraliza la atención en los métodos de aproximación para resolver el problema de dispersión (BA, IA, CDW, SPB, SE, etc). Pero en cuanto a la emisión de radiación se refiere, se necesita una correcta descripción de la estructura

interna de los sistemas que colisionan.

Otro punto también interesante es el hecho que estamos describiendo el proceso con un modelo de átomo aislado. Pero el experimento se realizó sobre una lámina sólida de Carbono. Esto es de destacar por el hecho de que los electrones que más contribuyen al pico de REC son los de valencia, que en el sólido no se encuentran definidamente ligados a un sólo átomo.

### 3.10 CAPTURA ELECTRONICA MECANICA

En esta sección vamos a tratar algo sobre la captura electrónica, que hemos llamado "mecánica" (MEC) porque el mecanismo de captura, es decir el operador relevante que produce la transición, es el potencial entre las partículas, y no el campo de radiación.

El primero en estudiar este proceso teóricamente fue L.H.Thomas en 1927 [94] dentro del formalismo de la mecánica clásica. La característica fundamental del estudio de Thomas es haber pensado la captura como un fenómeno de dos pasos, en el cual primero el proyectil colisiona con el electrón activo y, en una segunda colisión, éste es dispersado por el núcleo blanco. Utilizando la fórmula de Rutherford para cada colisión obtuvo una dependencia en  $v^{-4}$  de la sección eficaz total para altas energías. Además predijo la existencia de un máximo en la sección eficaz diferencial en el ángulo del proyectil,

consecuencia de la primera colisión en la cual el proyectil pesado desvía muy poco su trayectoria. Para una colisión de protón-hidrógeno en alta energía este ángulo es de aproximadamente  $10^{-3}$  rad., lo que coincide con las observaciones experimentales [95, 96].

La dependencia con la velocidad y la posición del ángulo crítico son correctamente predichas por el modelo de Thomas, sin embargo, como mostraron Bates y Mapleton [97], el resultado de la sección eficaz total era incorrecto.

Oppenheimer [98], Brinkman y Kramers [99] publicaron los primeros resultados cuánticos obtenidos con la aproximación de Born, sin considerar el término internuclear. Estos obtuvieron una dependencia en  $v^{-12}$  en el límite de alta velocidad, y no encontraron el ángulo crítico. En 1948 Jackson y Schiff [100] muestran que el resultado de DBK cambia en más de un 30% aquel límite, si se tiene en cuenta el potencial internuclear. Esto produjo gran confusión porque el potencial internuclear no puede producir transiciones electrónicas y no debería influir tan fuertemente. Recién en 1955 Drisko [101] resuelve el problema. Suponiendo que, si el proceso ocurre como lo había pensado Thomas, debe corresponderse con un cálculo cuántico en segunda aproximación de Born [102]. En efecto, el resultado de Drisko [42] muestra máximos en la sección eficaz diferencial; la sección eficaz total tiene dos términos, uno con  $v^{-4}$  y otro con  $v^{-12}$ , y la contribución de la interacción internuclear se cancela entre el primer orden y el segundo. Para transiciones

1s-1s y asintóticamente en altas velocidades la sección eficaz total de Drisko es

$$\sigma_{\text{Asin}}^{\text{MEC}} = 0.3 \frac{2^{18} \pi}{5} \frac{(Z_p Z_T)^5}{v^{12}} + \frac{2^4 \pi^2}{(Z_p + Z_T)} \frac{(Z_p Z_T)^5}{v^{11}} \quad (3.39)$$

El segundo término de esta ecuación es varios órdenes de magnitud mas chico que el primero en el rango de velocidades que tratamos aquí y no se tendrá en cuenta.

Para transiciones 1s-1s la aproximación de onda distorsionada del continuo (CDW)[103] conduce al mismo resultado para las secciones eficaces totales y diferenciales [73,74] y usaremos también este método para realizar la comparación entre REC y MEC.

Similarmente a lo que ya vimos en la sección 2.3, es posible demostrar que la sección eficaz diferencial para el caso mecánico es

$$\frac{d\sigma^{\text{MEC}}}{d\Omega} = \frac{\nu_T \nu_p}{(2\pi)^2} |T_{if}|^2 \quad (3.40)$$

donde  $\Omega$  es el ángulo sólido de salida del proyectil y  $T_{if}$  es el elemento de la matriz de transición, el cual en la CDW es bien conocido y está dado, para transiciones 1s-1s, por

$$T_{1s,1s}^{\text{CDW}} = F_T F_p (\vec{P}_T \cdot \vec{P}_p) \tilde{\psi}_i(\vec{w}_T) \tilde{\psi}_f^*(\vec{w}_p) \quad (3.41)$$

con

$$\bar{P}_r = \left( 1 - i a_r + i \frac{a_r}{A_r} \right) \bar{W}_r - i \frac{a_r}{A_r} \bar{v} \quad (3.42)$$

$$\bar{P}_r = \frac{a_r}{A_r} \left( \frac{\nu}{\beta_r} \bar{W}_r + i \bar{v} \right) \quad (3.43)$$

El resto de la nomenclatura tiene el mismo significado que en la sección 3.6, haciendo  $\omega = 0$  en ecuaciones (3.25) a (3.27).

### 3.11 COMPARACION ENTRE CAPTURA MECANICA Y RADIATIVA

En esta sección compararemos los resultados que se derivan de las expresiones que obtuvimos para REC en las secciones 3.5 y 3.6 con los que presentamos para MEC en la sección anterior.

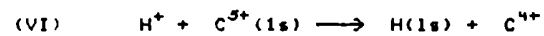
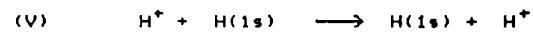
La dependencia con la velocidad de las secciones eficaces totales para REC y MEC asintóticamente es a través de una potencia en el denominador, lo cual en escala logarítmica en ambos ejes conduce a gráficos que son rectas. Como ya puntualizamos en la introducción de este capítulo, Raisbeck y Yiou [43] identificaron experimentalmente un cambio de pendiente en esta recta y consideraron la posibilidad de que provenga de la predominancia del mecanismo radiativo en alta energía.

Esta conclusión es correcta. Observando las ecuaciones (3.15) y (3.39) vemos que REC tiene, asintóticamente, una dependencia de  $v^{-5}$  con la velocidad y MEC una dependencia de  $v^{-12}$ . Si comparamos estas ecuaciones, tenemos un punto de cruce para

$$v \approx 49.4 Z_T^{5/7} \quad (3.44)$$

por encima del cual REC es mayor que MEC. Es decir, el mecanismo radiativo de captura a muy altas velocidades domina sobre el mecánico. Este resultado, ya obtenido por Briggs y Dettmann [60], muestra además que el "cruce" depende de la carga del núcleo blanco.

Las Figuras 7 y 8 muestran los resultados de las secciones totales calculados para los sistemas



En líneas llenas se muestran REC y MEC calculadas en la aproximación CDW, lo cual indicamos en el gráfico con REC-CDW y MEC-CDW. En líneas de puntos presentamos los resultados obtenidos con el modelo relativista de recombinación radiativa, expresado en la ecuación (3.16). En línea de trazos dibujamos además las expresiones asintóticas de REC y MEC (ecuaciones (3.15) y (3.39)). En la Figura 7 se observa que REC domina en

una energía que está por encima de 9 Mev ( es decir  $v=19.1$  en u.a. ) como predice la ecuación (3.44) para  $Z_T=1$ . Para energías menores que  $c/3$  (46 en u.a.) no hay diferencia entre las predicciones de la teoría de RR relativista y el cálculo de REC en CDW. Por encima de esta velocidad el modelo relativista predice secciones eficaces mas bajas. Para 120 Mev ( $v=c/2 \approx 68$ ), la diferencia es aproximadamente un factor dos. En esta región el cálculo de REC-CDW ya no es confiable.

En el caso de protón-Hidrógeno existe un rango amplio de energías en donde REC es importante, lo que no ocurre en la colisión protón-Carbono, como puede verse en la Figura 8. Este caso puede considerarse como límite, para impacto con protones, ya que cuando REC comienza a ser mayor que MEC ( $\sim 110$  Mev) los efectos relativistas también comienzan a ser importantes. Entonces para  $Z_T > 6$  sería conveniente comparar teorías de REC y MEC relativistas para definir mejor las regiones en que prevalece cada mecanismo. En este sentido, recientes experimentos parecen indicar que para  $Z_T$  mayores, MEC es predominante [104].

En la Figura 9 esquematizamos las regiones en que prevalece cada mecanismo en un diagrama  $v-Z_T$ . Del análisis anterior podemos fijar en aproximadamente  $c/2$  el límite para el tratamiento no relativista, lo cual conduce a la recta constante que separa las regiones en que domina REC relativista y no relativista. Por debajo de  $c/2$  el límite de las regiones para REC y MEC está dado por la ecuación (3.44), que se dibuja en la



Figura 9.

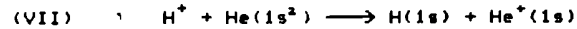
En la introducción a este capítulo dijimos que los únicos datos experimentales, de secciones eficaces totales, que se tienen con respecto a esta comparación son los de Raisbeck y Yiou de 1971 [43]. En la Figura 9 vemos que para blancos mas grandes que hidrógeno ya son necesarias energías muy grandes para observar la zona de "cruce". En estas regiones de energía se hace muy difícil medir los picos de REC, porque existe un fondo muy importante de Bremsstrahlung internuclear [105].

Hasta aquí hemos analizado la importancia relativa de estos dos mecanismos a nivel secciones eficaces totales. Hagamos ahora la comparación para las diferenciales.

La Figura 10 muestra los resultados para la distribución angular en el ángulo de salida del átomo reordenado en la colisión del caso I). Hemos considerado dos energías del protón incidente, 5 Mev y 10 Mev. En línea llena mostramos REC-CDW, el cual tiene una forma picada en la dirección hacia adelante ( $\Theta = 0$ ). En línea de trazos mostramos MEC-CDW, que tiene un máximo también en  $\Theta = 0$  y presenta además el pico de Thomas alrededor de  $10^{-3}$  rad. Es interesante ver que a 5 Mev, REC es 3 veces mas grande que MEC en la dirección hacia adelante, aún cuando en la sección eficaz total es mayor MEC (ver Figura 7). Además en 10 Mev, cuando ambos mecanismos dan la misma sección eficaz total, REC es 2 órdenes de magnitud mayor en  $\Theta = 0$ . Un aspecto muy importante que se observa en la figura 10 es que el

pico de Thomas no está enmascarado por el mecanismo radiativo, ésto hace que en su análisis no se deba tener en cuenta el mecanismo radiativo.

En la Figura 11 mostramos también secciones eficaces diferenciales en el ángulo del proyectil pero para una reacción de la cual se tienen datos experimentales [106], esta es



a 7.4 Mev de energía de los protones incidentes

Mostramos resultados de MEC en la aproximación CDW, que venimos usando hasta ahora. Para calcular REC-CDW hemos utilizado funciones hidrogénicas con carga efectiva 1.687 y energía de ligadura  $\epsilon_f = -0.917$  [89]. Los resultados experimentales (puntos en la Figura 11) fueron obtenidos por Horsdal-Pedersen y col. [106] con el propósito de estudiar el proceso de dispersión doble, el cual se manifiesta por la presencia del pico de Thomas. Un resultado muy importante que se observa nuevamente en la distribución angular, es que REC no compite con MEC en la zona del pico de Thomas.

Para esta colisión la sección eficaz total de MEC es dos órdenes de magnitud mas grande que REC, sin embargo en la Figura 11 se observa que la diferencia en la dirección hacia adelante es de un factor 5.

En síntesis, en esta sección hemos mostrado que la captura radiativa en algunos casos provee secciones eficaces totales mayores que las que habitualmente se consideran en captura

mecánica. En los casos en que esto no es así, de todos modos puede ocurrir que en la sección eficaz diferencial REC sea mas importante en ángulos pequeños.

### 3.12 IONIZACION RADIATIVA Y CAPTURA AL CONTINUO

La ionización radiativa (RI) es también llamada por algunos autores bremsstrahlung primario. Esta denominación no es correcta, ya que, en el bremsstrahlung primario no se especifica el estado final del electrón activo, mientras que en ionización radiativa, el electrón sólo finaliza en el continuo del sistema.

Existen varios modelos teóricos: encuentro binario [6], aproximación de Born, aproximación impulso [5], y modelo binario de Bethe-Heitler en la región relativista [107]. Con todos se ha obtenido buen acuerdo con los experimentos. En esta sección vemos brevemente como se deduce el resultado previo de ionización radiativa, obtenido por Jakubassa y col. [5]. Además, mostramos las expresiones para emisión radiativa en captura al continuo, obtenidas por Martiarena y col. [8]. La profundización de este tema no forma parte de los objetivos de esta Tesis, pero usamos estos resultados para estudiar la importancia relativa de cada proceso.

Si en la ecuación (3.34) reemplazamos  $\psi_f(\vec{r}_p)$  por la función del continuo  $D^+(Z_p, \vec{k}_e, \vec{r}_p)$ , se obtiene el resultado (2.10) de Ref. 5 para RI.  $\vec{k}_e$  es el momento del electrón ionizado. Con el

elemento de matriz así obtenido puede expresarse la sección eficaz en la aproximación impulso.

Para la captura al continuo (RECC) en primera aproximación de Born, Martiarena y col. [8] obtuvieron la expresión

$$\frac{d\sigma_{RECC}^{Born}}{d\omega d\Omega_e} = \frac{2\omega v^2}{9c^3(2\pi)^5} |W_{\rho_2}|^2 (|W_{T_2}|^2 + Z_r^2) |\tilde{\psi}_i(W_{T_2}) \cdot \tilde{\psi}_f^*(W_{\rho_2})|^2 \quad (3.45)$$

Este resultado permite extraer conclusiones que son similares a las que obtuvimos para captura a estados ligados del proyectil.

## **CAPITULO 4**

### **PROCESOS DIRECTOS**

#### 4.1 DESCRIPCION Y ANTECEDENTES

En las colisiones de iones rápidos con la materia, se emite radiación proveniente de los procesos que ya han sido tratados anteriormente (REC, REL, REX, RI) en el marco de la teoría de colisiones de iones con átomos, en donde la radiación aparece como un mecanismo de primer orden. Las funciones de onda que corresponden al sistema físico sin perturbar son las que describen el proceso de colisión mecánica. Decimos en estos casos, que hay emisión de radiación durante la colisión.

Por otra parte ocurren otros procesos, que llamamos postcolisionales [108], en donde la radiación proviene de bremsstrahlung de partículas cargadas producidas durante las colisiones primarias. Estos procesos secundarios, o eventualmente terciarios, ocurren con blancos sólidos. En particular, el bremsstrahlung de electrones secundarios (SEB) resulta ser competitivo con la dispersión elástica radiativa (REL). SEB es un proceso en que los electrones ionizados por colisión producen radiación a través del bremsstrahlung con núcleos del resto de los átomos del blanco. Esta es una fuente importante de producción de rayos x, sobre todo en el caso de espectroscopía con haces de iones [27,109]. A grandes rasgos, la sección eficaz de SEB viene dada por el producto de las secciones eficaces de ionización y de bremsstrahlung [110-114]. No ahondaremos en este tema y sólo nos limitaremos a presentar resultados obtenidos por otros autores.

En este capítulo estudiaremos la emisión de radiación durante la colisión debida a procesos directos, es decir REX y REL. Por practicidad, en REX diferenciamos la excitación y la desexcitación radiativa, aunque después veremos que cambiando el signo de la energía del fotón se obtiene uno del otro.

No hemos encontrado antecedentes teóricos ni experimentales acerca de la excitación radiativa. Posiblemente ésto sea así porque las secciones eficaces son bajas, y porque el proceso de emisión de radiación cuando el electrón sube, no parece posible a primera vista [115]. Este proceso es posible ya que el proyectil no sólo cede energía para excitar al electrón, sino que también puede entregar energía al campo de radiación para crear un fotón. En alta energía este proceso siempre es posible y veremos que se obtiene un espectro de radiación continua. Por ejemplo veremos que, para protones de 100 Kev incidiendo sobre átomos de Hidrógeno, el espectro tiene un máximo en la región del espectro visible con un ancho que abarca desde el infrarrojo hasta el ultravioleta, y decrece cuando aumenta la energía del fotón.

La desexcitación radiativa está íntimamente relacionada con el ensanchamiento de línea por colisión (CB), el cual se tiene en cuenta en los cálculos de astrofísica [12,13]. En la sección 4.7 mostraremos espectros de emisión en donde se aprecia el ensanchamiento por colisión.

Tanto en excitación como en desexcitación usaremos la aproximación Eikonal Simétrica (SE) [116,117] para describir los

autoestados del Hamiltoniano mecánico  $H_m$ . Elegimos esta aproximación por dos razones: porque ha dado muy buenos resultados para la excitación mecánica [118,119], y porque las funciones de onda son ortogonales 'off-shell', como lo requiere el formalismo.

REL, en cambio, es un proceso que ya ha sido estudiado tanto desde el punto de vista experimental como teórico. Fue identificado experimentalmente por Ishii y Morita en 1984 [10,11], y Amusia en 1983 [9] lo estudió por primera vez en forma teórica llamándolo, Bremsstrahlung Atómico (AB). Nuestro REL es igual al AB de Amusia, pero preferimos usar esta nomenclatura porque en realidad la palabra bremsstrahlung involucra los cuatro procesos que describimos en el capítulo 1. Es cierto, de todos modos, que REL tampoco es una nomenclatura muy feliz en el sentido que la palabra elástico no sugiere emisión de radiación. A pesar de ésto preferimos usarla para indicar este proceso, y recordar que "elástico" indica que el electrón no cambia de estado, pero el proceso total es inelástico ya que se crea un fotón. Ishii y Morita [10,11] también han calculado REL usando la segunda aproximación de Born y obtuvieron buen acuerdo con los experimentos. Aquí presentamos resultados de REL calculados en la aproximación eikonal simétrica y obtenemos buenos resultados comparando con los mismos experimentos.

Como ya se demostró en 2.5, el bremsstrahlung entre sistemas (ISB) contribuye en la dispersión elástica radiativa, y



no en la excitación radiativa. Veremos que, en el rango de rayos x blandos, el ISB es mucho mas pequeño que el EB pero, cuando se entra en la región de rayos x duros [20], el ISB comienza a ser el término dominante, como ya lo anticiparan Folkmann y col. [27, 109].

#### 4.2 BREMSSTRAHLUNG ELECTRONICO

En esta sección calcularemos el tercer término ( $H_{lj}^{ED}$ ) de la ecuación (2.23) que, como veremos, es el más importante en el rango de energías de interés en este trabajo.

Analicemos primero este elemento de matriz en la aproximación de Born Coulombiana. En esta aproximación las funciones de onda de  $H_m$  están dadas por las ecuaciones (2.30) y (2.31), y el gradiente está calculado sobre la coordenada  $\vec{r}_T$ . El elemento de matriz de EB en la aproximación dipolar queda, entonces

$$H_{lT}^{ED} = (2\pi)^3 \delta(\vec{K}_i - \vec{K}_f) \left[ -i A_0 b_{T0} \hat{\lambda}_\ell \cdot \int d\vec{r}_T \psi_f^*(\vec{r}_T) \vec{\nabla}_{\vec{r}_T} \psi_i(\vec{r}_T) \right] \quad (4.1)$$

La condición  $\vec{K}_i = \vec{K}_f$  impuesta por la función  $\delta(\vec{K}_i - \vec{K}_f)$  indica que el proyectil pasa sin interactuar, es decir es un simple observador, mientras el electrón interactúa con el campo de radiación sólo en presencia del núcleo blanco. Vemos en la

ecuación anterior que la integral es el conocido elemento de matriz de la transición espontánea dipolar, el cual vale cero si el estado inicial es el fundamental, o es igual al final, y es distinto de cero cuando el número de impulso angular orbital del estado final supera en uno al del estado inicial. Por lo tanto, la aproximación de Born predice emisión de radiación sólo en el caso del decaimiento natural, de acuerdo a las reglas de selección ya conocidas, y el proyectil no participa en la colisión.

Entonces, el primer orden de las funciones de onda de  $H_m$  no describe la radiación continua ni para REL ni para REX. Esto se debe a que, en los procesos directos, las funciones de onda no distorsionadas no contienen información acerca del potencial del proyectil. En REC, como ya vimos, ésto no es así, el primer orden de Born no sólo da radiación continua sino que explica satisfactoriamente las estructuras de los espectros y las secciones eficaces totales. La diferencia entre un caso y otro radica en el hecho de que en captura electrónica, las funciones de onda no distorsionadas contienen la información del blanco y del proyectil en los correspondientes estados ligados inicial y final.

De la discusión anterior se ve claramente que, para mecanismos radiativos en procesos directos, es necesario usar funciones de onda distorsionadas. En trabajos previos sobre REL, Ishii y Morita han usado la segunda aproximación de Born. En esta tesis usaremos un método de onda distorsionada con el cual

se han encontrado los mejores resultados para la excitación mecánica [118,119], la aproximación eikonal simétrica (SE) [116,117]

Las funciones de onda de  $H_m$  en la SE pueden escribirse en la forma

$$\psi_i^+ \approx e^{i \bar{k}_i \cdot \bar{R}_T} \psi_i(\bar{r}_T) E^+(z_p, -\bar{v}_i, \bar{r}_p) \quad (4.2)$$

$$\psi_f^- \approx e^{i \bar{k}_f \cdot \bar{R}_T} \psi_f(\bar{r}_T) E^-(z_p, -\bar{v}_f, \bar{r}_p) \quad (4.3)$$

donde

$$E^\pm(z, \bar{v}, \bar{r}) = e^{\mp i z/v} \ln(vr \mp \bar{v} \cdot \bar{r}) \quad (4.4)$$

El elemento de matriz de  $H_{mr}$  en esta aproximación [120] queda

$$H_{lT}^{eo} = -i b_{ro} A_o \hat{\lambda}_l \cdot [\bar{Q}_p + \bar{Q}_T] \quad (4.5)$$

donde

$$\bar{Q}_p = F_f \bar{E}_1 \quad ; \quad \bar{Q}_T = \bar{R} E_2 \quad (4.6)$$

$$F_f = \int d\bar{r}_T \psi_f^*(\bar{r}_T) e^{i \bar{p} \cdot \bar{r}} \psi_i(\bar{r}_T) \quad (4.7)$$

$$\bar{R} = \int d\bar{r}_r \psi_f^*(\bar{r}_r) e^{i\bar{P} \cdot \bar{r}_r} \bar{\nabla}_{\bar{r}_r} \psi_i(\bar{r}_r) \quad (4.8)$$

$$\bar{E}_1 = \int d\bar{r}_r e^{-i\bar{P} \cdot \bar{r}_r} E^*(z_r, -\bar{v}, \bar{r}_r) \bar{\nabla}_{\bar{r}_r} E^+(z_r, -\bar{v}, \bar{r}_r) \quad (4.9)$$

$$E_2 = \int d\bar{r}_r e^{-i\bar{P} \cdot \bar{r}_r} E^*(z_r, -\bar{v}, \bar{r}_r) E^+(z_r, -\bar{v}, \bar{r}_r) \quad (4.10)$$

donde  $\bar{v}$  es la velocidad relativa inicial y  $\bar{P}$  es la transferencia de momento  $\bar{P} = \bar{K}_i - \bar{K}_f$   $F_f$  es el factor de forma atómico.  $\bar{R}$  es una integral vectorial que contiene el gradiente de las funciones electrónicas.  $\bar{E}_1$  es una integral vectorial que contiene el gradiente de la fase eikonal.

La aproximación SE, para procesos directos, tiene una importante ventaja adicional. Las funciones de onda inicial y final dadas por las ecuaciones (4.2) y (4.3) son ortogonales, es decir  $\langle \psi_f^- | \psi_i^+ \rangle = 0$ . Esto es una consecuencia directa de que la integral  $E_2$  vale cero. La demostración de la ortogonalidad puede verse en el Apéndice IV. Como ya hemos discutido, esta propiedad de ortogonalidad conduce a que no exista radiación espuria del centro de masa, con lo cual estamos seguros de que la contribución del término de EB es genuina. Como  $E_2$  vale cero, entonces el término de EB contiene sólo al vector  $\bar{Q}_r$ . En la ecuación (4.9) la integral sobre  $\bar{r}_r$  puede evaluarse en forma

analítica (ver Apéndice IV), con lo que el resultado final del EB es

$$H_{\ell\tau}^{\text{EB}} = -i A_0 b_{\tau 0} S F_{\ell} \left[ \frac{p_{xy}}{p^2} (1-ia) {}_2F_1\left(ia, (1-ia), 2, \frac{p_{xy}^2}{p^2}\right) (\hat{\lambda} \cdot \hat{x}) + \right. \\ \left. + {}_2F_1\left(ia, (1-ia), 1, \frac{p_{xy}^2}{p^2}\right) (\hat{\lambda} \cdot \hat{z}) \right] \quad (4.11)$$

donde  $p^2 = \overline{p} \cdot \overline{p}$  ;  $p_{xy} = Ki \sin \theta$

$$S = -4\pi i \left(\frac{a}{p^2}\right) \left(\frac{p^2}{4v^2}\right)^{-ia} r^2 (1-ia)$$

$\theta$  es el ángulo de salida del proyectil y, como es usual,  $a = Z_p/v$ .

Puede verse un cálculo analítico general de los factores  $F_{\ell}$  en la Ref. 121. En el Apéndice V mostramos la forma explícita de los mismos para algunos casos particulares de estados hidrogénicos, que usaremos en este capítulo. También en el Apéndice V mostramos resultados particulares para el vector  $\overline{R}$ . Este no es necesario en la aproximación SE pero sí, por ejemplo, en CDW.

En las ecuaciones (4.7) a (4.10) vemos que la transición de los estados atómicos sólo aparece en  $F_{\ell}$  y  $\overline{R}$ . No sucede lo mismo que en captura, en donde se mezclan las funciones electrónicas con las que describen el continuo proyectil-electrón. Esto significa que para todas las

transiciones en excitación y desexcitación radiativa (REX) y en dispersión elástica radiativa (REL) se tienen las mismas integrales  $\bar{E}_1$  y  $E_2$ , lo único que cambia en cada caso es el factor de forma. Si  $\varphi_i = \varphi_f$  se tiene REL; si  $\varphi_f \neq \varphi_i$  REX, excitación para  $E_f > E_i$  y desexcitación para  $E_f < E_i$ .

Cada término de la ecuación (4.5) tiene un significado físico distinto, dependiendo de las funciones sobre las que actúan los operadores impulso (gradientes).  $\bar{Q}_p$  representa el bremsstrahlung del electrón en el campo del proyectil.  $\bar{Q}_T$ , por el contrario representa el bremsstrahlung del electrón en el campo del núcleo blanco. De lo que se deduce que en la aproximación SE toda la contribución al término de EB viene del bremsstrahlung del electrón con el proyectil. El blanco está representado matemáticamente en el factor de forma  $F_f$ .

En las secciones 4.4 a 4.8 presentamos resultados de espectros, secciones eficaces totales, distribuciones angulares y dependencia con la carga del proyectil.

#### 4.3 COMPARACION ENTRE EL BREMSSTRAHLUNG ENTRE SISTEMAS Y EL BREMSSTRAHLUNG ELECTRONICO

La contribución del bremsstrahlung electrónico está dada por la ecuación (4.11), en la cual observamos que  $H_{ij}^{EB}$  depende del factor  $b_{T0}$ , que es del orden de la unidad. Para el ISB la ecuación (2.35) depende del factor  $M_{T,p}^{-2}$  en  $B_{T0}^2$ . Esto nos

dice, en principio, que para los casos que estamos tratando, proyectiles y blancos pesados, el ISB es muy pequeño comparado con el EB. Sin embargo, para muy altas energías del fotón, el ISB puede dominar sobre el EB. En este rango de energías del fotón, de todos modos, la validez de la aproximación dipolar es dudosa, y debería hacerse un cálculo teniendo en cuenta los efectos de retardación.

En la discusión realizada en el último párrafo de la sección 2.5 parecería existir una dificultad, ya que el ISB depende del sistema de coordenadas elegido. La misma es sólo aparente, porque el término de EB también depende del sistema de coordenadas en el gradiente electrónico ( $\bar{\nabla}_{\vec{r}_j}$ ), de modo tal que la suma es independiente de las coordenadas elegidas. En los casos que trataremos aquí el ISB es muy pequeño comparado con el EB. Entonces, si en el cálculo consideramos solamente el bremsstrahlung electrónico, la diferencia no será significativa.

Si las funciones de onda aproximadas no son ortogonales, la dependencia del bremsstrahlung electrónico con el sistema de coordenadas elegido, será, en cambio, notable. A modo de ejemplo observemos que Briggs y Dettmann [60] fueron los primeros en notar que para REC el elemento de matriz calculado con  $\bar{\nabla}_{\vec{r}_p}$  es distinto que el calculado con  $\bar{\nabla}_{\vec{r}_T}$ , lo cual se debe, tal como lo mostraron Shakeshaft y Spruch [24], a que las funciones de onda, en primera aproximación de Born, usadas por Briggs y Dettmann, no son ortogonales.

#### 4 4 ESPECTROS FOTONICOS DE DISPERSION ELASTICA RADIATIVA

Analizaremos primero el espectro fotónico que se obtiene en la colisión de protones con Aluminio, de la cual Ishii y Morita han presentado datos experimentales y teóricos [10,11,110]. Las mediciones fueron realizadas a  $90^\circ$  respecto del haz incidente y en la región de los rayos x blandos (2 a 6 Kev), con energías de impacto de los protones incidentes de 1 a 4 Mev. Para calcular el espectro fotónico usamos la expresión (2.21) de la sección eficaz diferencial y reemplazamos el elemento de matriz por la expresión (4.11).

En principio los 13 electrones del Al contribuyen al proceso de REL. Para estimar la contribución de cada capa, hemos realizado los cálculos con factores de forma hidrogénicos (Ver Apéndice V), y encontramos que en la región de energía del fotón aquí considerada, la contribución de la capa K es mayor por lo menos en 3 órdenes de magnitud a la de la capa L. Entonces ponemos mas énfasis en la descripción de REL proveniente de la transición  $1s-1s$  y usamos un factor de forma hidrogénico con una carga efectiva  $(13-5/16)=12.675$ .

La figura 12 muestra los resultados experimentales de Ishii y Morita. Las líneas de trazos muestran resultados teóricos de los mismos autores, y las líneas llenas los nuestros.

Primero observemos que en esta región, como ya puntualizamos, el término de ISB es mucho mas pequeño que el de EB. Además se ven en el gráfico las diferentes pendientes de



cada uno, de modo tal que a energías del fotón mas altas ( $>11$  Kev en este caso), el ISB es el proceso preponderante. La línea de trazos indicada con AB corresponde al cálculo de Ishii y Morita en segunda aproximación de Born. Nótese que acuerda muy bien con los experimentos, así como el resultado obtenido por nosotros en la eikonal simétrica (indicado 1s-1s). También se muestra en la figura la contribución de RI y de SEB calculados por Ishii y Morita. Debe tenerse presente que los puntos experimentales representan toda la radiación emitida en la colisión (no está medido en coincidencia), por lo que para comparar resultados teóricos con las mediciones deben sumarse todos los efectos. En este caso RI, SEB y los electrones de las capas externas L y M del Al, contribuyen poco al espectro en este rango de energías; REL 1s-1s es el proceso dominante, por lo cual este es un excelente ejemplo para testear el modelo propuesto.

En la Figura 13 mostramos resultados para la misma colisión del caso anterior pero con una energía de protones de 4 Mev. La nomenclatura es la misma que en la Figura 12. Es interesante observar que en este caso SEB es el proceso dominante. Nuestro cálculo de REL 1s-1s da nuevamente un resultado similar al de Ishii y Morita.

#### 4.5 DISTRIBUCION ANGULAR DE LA RADIACION EN DISPERSION ELASTICA RADIATIVA

En la Figura 14 mostramos distribuciones angulares de fotones para REL 1s-1s. La energía de impacto de los protones es de 1.5 Mev y REL es el proceso dominante en la descripción del espectro. Los puntos, con su banda de error, representan los datos experimentales de Ishii y Morita [10]. Para cada ángulo del fotón emitido, los resultados se obtuvieron integrando el espectro en energía del fotón, entre 5.18 y 5.57 Kev, y luego normalizando respecto del valor integrado a  $90^\circ$ .

En la Figura 14 observamos que el espectro experimental no es simétrico respecto de la dirección  $90^\circ$ . Sin embargo ambos resultados teóricos sí lo son. Esta simetría es una consecuencia directa de haber realizado la aproximación dipolar, en la cual desaparece la dirección del momento del fotón.

Recientemente Ozawa y col. [122] obtuvieron nuevos resultados experimentales para la colisión  $H^+ + Al$  a 0.5 Mev. En este caso la integración del espectro en la energía del fotón se realizó entre 2.85 y 3.00 Kev. En la Figura 15 mostramos estos resultados y, al igual que en el caso anterior, observamos que la aproximación dipolar da también distribuciones simétricas. Es interesante notar que la distribución angular experimental de Ozawa y col. (Figura 15), resulta ser más próxima a una curva simétrica que la de la Figura 14. Observamos entonces que cuanto más alta es la energía del fotón, mayor es la asimetría. Esto

sugiere que la asimetría proviene de un efecto de retardación.

La interpretación de Ozawa y col. es distinta. Estos autores remarcan que, teóricamente, el bremsstrahlung atómico predice distribuciones angulares simétricas y que los experimentos lo confirman. Debemos puntualizar que, en primer lugar, la simetría es una particularidad de la aproximación dipolar usada, y no necesariamente del proceso de REL. En segundo lugar, la distribución experimental no es exactamente simétrica, lo cual puede verse claramente en la Figura 15. Obsérvese en particular que, para los puntos correspondientes a  $30^\circ$  y  $150^\circ$ , la ordenada en el gráfico no es la misma, ya que las bandas de error resultan disjuntas.

Sería interesante realizar los cálculos sin la aproximación dipolar, para ver si esta asimetría es adjudicable a REL o a algún otro proceso aún no tenido en cuenta. El bremsstrahlung de electrones secundarios (SEB) presenta distribuciones asimétricas [114], pero aquí debe descartarse porque, al igual que RI, es muy pequeño para estas energías de impacto de los protones. Si la hipótesis de la influencia del impulso del fotón es acertada, el efecto de retardación es mas notable que en REC [123].

#### 4.6 DEPENDENCIA DE LA DISPERSION ELASTICA RADIATIVA CON LA CARGA DEL PROYECTIL

Un punto muy importante a tratar es la dependencia de la emisión fotónica con la carga del proyectil. Este tema fue investigado primero por Schnopper et al [124], quienes midieron radiación continua proveniente de la colisión de iones de oxígeno ( $O^{8+}$ ) y protones con  $H_2$ . Estos autores sugirieron que la sección eficaz, para una dada velocidad del proyectil, debería incrementarse con su carga al cuadrado ( $Z_p^2$ ). Además, el segundo orden elegido por Ishii y Morita también predice una dependencia con  $Z_p^2$ .

En la Figura 16 se muestran los resultados que obtuvimos para cuatro energías de bombardeo distintas (0.1, 0.5, 1.0 y 5.0 Mev) de iones multicargados sobre hidrógeno atómico. En todos los casos se consideró una única energía del fotón, igual a 27.2 eV (1 u.a.). Observamos que el comportamiento en  $Z_p^2$  depende de la velocidad del proyectil. Cuanto mayor es su velocidad, mayor es el rango en donde REL tiene este comportamiento.

Por otra parte vemos también que, para velocidades más bajas, la sección eficaz tiende a una constante, o disminuye. Recientemente ha cobrado interés un comportamiento similar en ionización y excitación mecánica, donde se ha observado que por encima de cierta carga del proyectil, la sección eficaz tiende a estabilizarse en un valor constante. A este comportamiento se lo ha llamado saturación [118,125], y vemos que también se obtiene

saturación en la dispersión elástica radiativa. La disminución de la sección eficaz, sin embargo, se debe a que el cociente  $Z_p/v$  comienza a estar fuera de la región de validez de la aproximación SE.

#### 4.7 ESPECTROS FOTONICOS PARA EXCITACION Y DESEXCITACION RADIATIVA

En esta sección y en la que sigue ejemplificamos el proceso de emisión de radiación en excitación y desexcitación radiativa considerando un blanco de hidrógeno bombardeado por protones. Las funciones de onda del electrón en el blanco son exactas para este sistema y, en todos los casos sera  $\psi_i \neq \psi_f$ . La transición de subida está caracterizada por una diferencia de energía  $E_i - E_f < 0$  y la de bajada por  $E_i - E_f > 0$ .

La sección eficaz diferencial se obtiene reemplazando el elemento de matriz (4.11), con los factores de forma correspondientes a cada transición. En las Figuras 17 y 18 mostramos los resultados obtenidos para excitación y desexcitación radiativa, para una energía de los protones incidentes, de 100 Kev. Estos espectros ya están integrados en todos los ángulos de emisión del fotón. Estas integraciones, en la aproximación dipolar, son sencillas y han sido realizadas analíticamente.

El espectro de desexcitación tiene un pico pronunciado para

una energía del fotón coincidente con la diferencia de energías de ligadura entre el estado inicial y el final ( $\omega = \epsilon_i - \epsilon_f$ ). Este es el motivo por el cual a este proceso se lo suele llamar ensanchamiento por colisión. Es interesante ver que no se cumplen las mismas reglas de selección que en el caso del decaimiento aislado. Esto se debe a que la contribución principal proviene del bremsstrahlung del electrón con el proyectil y no con el núcleo blanco. Por otra parte, puede verse también el efecto de la colisión en el factor de forma, a través de la exponencial que contiene la diferencia de momentos del proyectil  $|\vec{P}| = |\vec{k}_i - \vec{k}_f|$ . Nótese que si  $\vec{P} = 0$ , el factor de forma se convierte en el producto escalar de las funciones electrónicas.

Recordemos que en la aproximación de Born se encontró que el proyectil pasa sin interactuar y, en consecuencia, se obtiene el espectro de líneas característico. Estas líneas son muy agudas y su ancho depende de la inversa del tiempo de decaimiento. Pero, en la aproximación eikonal simétrica, el proyectil interactúa con el electrón, sufre un cambio de momento, y entonces se tiene el ensanchamiento de la línea característica, inducida ahora por el proyectil. La Figura 17 muestra estos espectros para las transiciones electrónicas  $2s, 2p_0, 2p_{\pm 1} \longrightarrow 1s$  y  $3s \longrightarrow 1s$ . Puede verse que la posición de los picos (10.2 y 12.1 eV) coincide con las líneas espectrales.

En la Figura 18 se muestra el espectro de emisión para las transiciones inversas de las anteriores,  $1s \longrightarrow 2s, 2p_0, 2p_{\pm 1}$  y

$1s \rightarrow 3s$ . Las secciones eficaces son bajas (del orden del barn =  $10^{-24} \text{ cm}^2$ ) y decrecen cuando aumenta la energía del fotón. Nótese que la parte principal del espectro se encuentra entre el infrarrojo y el ultravioleta, región ésta de gran interés astrofísico.

Veamos que la excitación radiativa está relacionada, para el rango de absorción, con el ensanchamiento por colisión. Primero observemos en las figuras anteriores que en ambos casos las secciones eficaces tienden a cero cuando  $\omega \rightarrow 0$ . Definamos entonces la cantidad

$$\frac{d\sigma}{d\omega \omega^2 |A_0|^2} \quad (4.12)$$

El factor  $\omega^2 d\omega$  es un elemento de volumen del espacio de energías del fotón (a menos de un factor  $4\pi$ ).  $|A_0|^2$  es la intensidad de la radiación espontánea. En el caso mas general en que el sistema se encuentre en un campo externo,  $|A_0|^2$  se debe reemplazar por la intensidad de dicho campo.

En la Figura 19 se muestran los resultados de la magnitud (4.12) como función de la energía del fotón para la colisión de protones de 100 Kev con hidrógeno. Las curvas en línea llena corresponden a excitación y la de trazos a REL  $1s-1s$ . El hecho de haber dividido la sección eficaz por  $\omega^2 |A_0|^2$  hace que la cantidad (4.12) no se anule para  $\omega = 0$ .

La zona de energías positivas corresponde a emisión y la de energías negativas a absorción. Entonces se observa emisión por

REX y REL sólo en la región de energías  $\omega$  positivas.

Los resultados de la figura 19 tienen otra interpretación. Si se invierte el proceso, es decir de  $i \rightarrow f$  a  $f \rightarrow i$  y de  $\omega$  a  $-\omega$ , la zona de  $\omega < 0$  representa desexcitación radiativa, con las líneas y el ensanchamiento colisional discutido antes. Entonces, en el mismo gráfico, tenemos excitación radiativa para  $\omega > 0$  y desexcitación para  $\omega < 0$ . Con esta interpretación la excitación contiene a la desexcitación radiativa en la continuación analítica a las energías negativas del fotón, y viceversa. En el caso de la dispersión elástica radiativa la gráfica es simétrica, con la divergencia en  $\omega = 0$  porque  $E_i = E_f$ .

#### 4.8 SECCIONES EFICACES TOTALES DE EXCITACION RADIATIVA

Integrando los espectros de la sección anterior sobre la frecuencia del fotón se obtiene la sección eficaz total.

La Figura 20 muestra la sección eficaz total en función de la energía del proyectil para excitación radiativa de hidrógeno por impacto de protones. Se consideraron las transiciones  $1s \rightarrow 2s, 2p_e, 2p_t, 3s$ .

Las secciones eficaces son muy pequeñas comparadas con el caso mecánico. Puede verse que la sección eficaz para excitación radiativa, en el máximo, es 6 órdenes de magnitud mas pequeña que para la excitación mecánica [118]. Por otra parte un fiteo de las curvas de la Figura 20 en la región de altas energías da un



comportamiento  $(\ln \nu)/\nu^2$ . Este es el mismo que presenta la excitación mecánica en alta energía [126], por lo que, en contraste con REC, las secciones eficaces correspondientes al mecanismo radiativo no sobrepasan nunca a las del mecánico.

## CONCLUSIONES

El logro central de esta tesis es la formulación general del proceso radiativo de tres partículas en colisión. Con este formalismo es posible describir todo el espectro fónico asociado a través de cuatro procesos: REC, RI, REL y REX; conteniendo cada uno tres términos: radiación del centro de masa, entre sistemas y electrónica, con significados físicos bien definidos. Este formalismo engloba en forma ordenada una serie de mecanismos propuestos por diversos autores para explicar espectros, en determinados rangos de energía, con una variedad de modelos simplificados (generalmente binarios).

Con este formalismo se adquiere un conocimiento más profundo de los procesos ya estudiados, y se puede avanzar en nuevas líneas no desarrolladas hasta el presente.

Entre los desarrollos teóricos podemos citar:

- Tratamiento relativista de la dinámica de la colisión y de los electrones activos.
- Un estudio más profundo de la ionización radiativa, teniendo en cuenta el continuo del proyectil y del blanco en el estado final.
- Una generalización del modelo a 4 partículas, esto es con dos electrones activos; y estudiar los espectros asociados a procesos dobles, tales como excitación y captura, doble captura, etc.

- Aplicación de la formulación teniendo en cuenta el momento del fotón. En un trabajo reciente [23], realizado en el Grupo de Colisiones Atómicas (IAFE), estudiamos la influencia de la retardación en REC, y en la actualidad estamos estudiando su efecto en procesos directos.

Además, de lo tratado en esta tesis surgen algunas propuestas experimentales, a los efectos de confirmar las predicciones realizadas. Por ejemplo:

- La confirmación de la existencia de REX
- La ausencia de bremsstrahlung entre sistemas, a primer orden en las autofunciones del Hamiltoniano mecánico, en procesos inelásticos.
- La determinación de las colas del ensanchamiento colisional para probar el modelo propuesto. De resultar positivo, sería interesante extenderlo a las bajas energías de impacto, de mayor interés en Física del Plasma.
- Otro punto importante es el fenómeno de saturación encontrado aquí (ver sección 4.6), en contraste con la predicción  $Z_P^2$ . Sería interesante confirmar experimentalmente este fenómeno, que podría tener cierto impacto tecnológico.

# APENDICE I

## UNIDADES ATOMICAS

Para hacer mas fácil la escritura de las ecuaciones y el cálculo numérico, se eligen unidades que eliminen las constantes mas usuales. Definimos las unidades atómicas fundamentales de la siguiente forma:

Unidad de carga =  $e$  = carga del electrón =  $4.8029 \cdot 10^{-10}$  e. s. u.

Unidad de masa =  $m$  = masa del electrón =  $9.108 \cdot 10^{-28}$  g

Unidad de acción =  $\hbar$  = cte de Planck dividido por  $2\pi$  =  
 $= 1.0544 \cdot 10^{-27}$  erg. seg

y las unidades derivadas se deducen del modelo de Bohr del átomo; así tenemos

Unidad de longitud =  $a$  = radio de la primera órbita de Bohr =  
 $= \hbar / m \cdot e^2$

Unidad de velocidad =  $v$  = velocidad del electrón en la primera órbita de Bohr =  $e^2 / \hbar$

Unidad de energía =  $E_0$  = 2 veces la energía de ionización del nivel fundamental del átomo de hidrógeno =  $e^2/a_0$

Unidad de tiempo =  $a_0/v_0$  = período clásico de la órbita de Bohr

Algunas equivalencias y fórmulas útiles son:

masa del protón = 1836 (u. a. m) ;  $E(\text{ev}) = 27.2 \times E(\text{u. a.})$

velocidad de la luz = 137.02 (u. a. v)

velocidad (u. a. ) =  $\sqrt{40 \cdot E(\text{Mev/nucl})}$  (clásico  $E = m \cdot v^2/2$ )

El factor relativista

$$\gamma = 1.067 \cdot 10^{-3} E(\text{Mev/nucl}) + 1$$

conduce a la velocidad en unidades atómicas  $v = \sqrt{1 - 1/\gamma^2}$

Una relación muy usada es la equivalencia de unidades para la sección eficaz diferencial en energía

$$\frac{d\sigma}{dE} (\text{barn/kev}) = 1.029 \cdot 10^9 \frac{d\sigma}{dE} \quad (\text{u. a.})$$

Para la sección eficaz en energía y ángulo sólido se tiene la misma relación anterior.

Para la unidad de superficie ( $a_0^2$ ) se tienen las siguientes equivalencias

$$1 \text{ barn} = 2.80 \cdot 10^7 (\text{u. a.}) = 10^{-24} \text{ cm}^2$$

## APENDICE II

## SISTEMA DE COORDENADAS Y MOMENTOS ASOCIADOS PARA EL PROBLEMA DE TRES CUERPOS

En este Apéndice mostramos la transformación de coordenadas y de impulso correspondiente a

$$\bar{x}_T, \bar{x}_P, \bar{x}_C \longrightarrow \bar{x}, \bar{R}_j, \bar{r}_j \text{ con } j = T, P \text{ ó } N$$

i) Coordenadas reactivas ( $j = P$ )

$$\begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{R}_P \\ \bar{r}_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{M} & \frac{M_T}{M} & \frac{M_P}{M} \\ \frac{\mu_P}{M_P} & -1 & \mu_P \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_C \\ \bar{x}_T \\ \bar{x}_P \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} \bar{\nabla}_{\bar{x}_C} \\ \bar{\nabla}_{\bar{x}_T} \\ \bar{\nabla}_{\bar{x}_P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{M} & \frac{\mu_P}{M_P} & 1 \\ \frac{M_T}{M} & -1 & 0 \\ \frac{M_P}{M} & \mu_P & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\nabla}_{\bar{x}} \\ \bar{\nabla}_{\bar{R}_P} \\ \bar{\nabla}_{\bar{r}_P} \end{bmatrix} \quad \dots (II.1)$$

ii) Coordenadas directas ( $j = T$ )

$$\begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{\nabla}_{\bar{R}_T} \\ \bar{\nabla}_{\bar{r}_T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{M} & \frac{M_T}{M} & \frac{M_P}{M} \\ 1 & -1 & 0 \\ -\frac{\mu_T}{M_T} & -\mu_T & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_C \\ \bar{x}_T \\ \bar{x}_P \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} \bar{\nabla}_{\bar{x}_C} \\ \bar{\nabla}_{\bar{x}_T} \\ \bar{\nabla}_{\bar{x}_P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{M} & -\frac{\mu_T}{M_T} & 1 \\ \frac{M_T}{M} & -\mu_T & -1 \\ \frac{M_P}{M} & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\nabla}_{\bar{x}} \\ \bar{\nabla}_{\bar{R}_T} \\ \bar{\nabla}_{\bar{r}_T} \end{bmatrix} \quad \dots (II.2)$$

iii) Coordenadas internucleares ( $j=N$ )

$$\begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{R}_N \\ \bar{r}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{M} & \frac{M_T}{M} & \frac{M_P}{M} \\ 0 & -1 & 1 \\ 1 & \frac{-M_T}{M_P+M_T} & \frac{-M_P}{M_P+M_T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_e \\ \bar{x}_T \\ \bar{x}_P \end{bmatrix} ; \quad \begin{bmatrix} \bar{\nabla}_{\bar{x}_e} \\ \bar{\nabla}_{\bar{x}_T} \\ \bar{\nabla}_{\bar{x}_P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{M} & 0 & 1 \\ \frac{M_T}{M} & -1 & \frac{-M_T}{M_T+M_P} \\ \frac{M_P}{M} & 1 & \frac{-M_P}{M_T+M_P} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\nabla}_{\bar{x}} \\ \bar{\nabla}_{\bar{R}_N} \\ \bar{\nabla}_{\bar{r}_N} \end{bmatrix} \quad \dots (II.3)$$

donde las masas reducidas son

$$\begin{aligned} \mu_P &= \frac{M_P}{M_P+1} & ; & & \mu_T &= \frac{M_T}{M_T+1} & ; & & \mu_N &= \frac{M_P+M_T}{M} \\ \nu_P &= \frac{M_T(M_P+1)}{M} & ; & & \nu_T &= \frac{M_P(M_T+1)}{M} & ; & & \nu_N &= \frac{M_P M_T}{M_P+M_T} \\ M &= M_P+M_T+1 & ; & & \eta &= 1-\mu_T\mu_P \end{aligned}$$

... (II.4)

Algunas relaciones útiles entre las coordenadas relativas usadas en esta tesis son [127]

$$\begin{aligned} \bar{r}_T &= \mu_P \bar{r}_P + \bar{R}_P & ; & & \bar{R}_T &= -\eta \bar{r}_P + \mu_T \bar{R}_P \\ \left\{ \begin{aligned} \bar{\nabla}_{\bar{r}_T} &= \mu_T \bar{\nabla}_{\bar{r}_P} + \eta \bar{\nabla}_{\bar{R}_P} \\ \bar{\nabla}_{\bar{R}_T} &= -\bar{\nabla}_{\bar{r}_P} + \mu_P \bar{\nabla}_{\bar{R}_P} \end{aligned} \right. & ; & & \left\{ \begin{aligned} \bar{\nabla}_{\bar{r}_P} &= \mu_P \bar{\nabla}_{\bar{r}_T} - \eta \bar{\nabla}_{\bar{R}_T} \\ \bar{\nabla}_{\bar{R}_P} &= \bar{\nabla}_{\bar{r}_T} + \mu_P \bar{\nabla}_{\bar{R}_T} \end{aligned} \right. \end{aligned} \quad (II.5)$$

# APENDICE III

## APROXIMACION DE BETHE-SALPETER PARA LAS INTEGRALES DE NORDSIECK

En este Apéndice calculamos, en forma aproximada, las integrales

$$\bar{J}_1 = \int d\bar{r} e^{i\bar{q}\cdot\bar{r}} D^*(\bar{p}_1, \bar{r}) \bar{V}_{\bar{r}} D^+(\bar{p}_2, \bar{r}) \quad (\text{III.1})$$

$$J_2 = \int d\bar{r} e^{i\bar{q}\cdot\bar{r}} D^*(\bar{p}_1, \bar{r}) D^+(\bar{p}_2, \bar{r}) \quad (\text{III.2})$$

donde aquí  $D^\pm$  se define en general, como la función distorsión de las autofunciones del continuo

$$\psi_{\bar{p}}^\pm = e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}} D^\pm(\bar{p}, \bar{r}) \quad (\text{III.3})$$

para cualquier potencial  $V$ . La idea es aproximar estas funciones con la técnica de Bethe y Salpeter [128]. Esta consiste en desarrollar las transformadas de Fourier de las funciones del continuo, en términos de una serie de potencias de la transformada de Fourier del potencial correspondiente. De la ecuación (9.13) de Ref. 3 se tiene, a primer orden



$$\tilde{\psi}_{\vec{p}}^{\dagger}(\vec{q}) \simeq (2\pi)^3 \delta(\vec{p}-\vec{q}) + \frac{2}{q^2 - p^2 \pm i\epsilon} \tilde{V}(\vec{q}-\vec{p}) + o(\tilde{V}^2) \quad (\text{III. 4})$$

i) CALCULO DE  $J_2$

Esta es una integral escalar. Reemplazando (III. 3) en (III. 2), y las transformadas de Fourier de las funciones del continuo, se tiene la expresión

$$J_2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \tilde{\psi}_{\vec{p}_1}^{\dagger}(\vec{q}) \tilde{\psi}_{\vec{p}_1}^*(\vec{q} - \vec{q} - \vec{p}_1 - \vec{p}_2) \quad (\text{III. 5})$$

Usando (III. 4), y el hecho de que el potencial es real obtenemos

$$J_2 \simeq 2 \tilde{V}(\vec{q}) \left[ \frac{1}{(\vec{p}_2 + \vec{q})^2 - \vec{p}_2^2} + \frac{1}{(\vec{p}_1 + \vec{q})^2 - \vec{p}_1^2} \right] \quad (\text{III. 6})$$

ii) CALCULO DE  $\bar{J}_1$

De la misma forma que en el caso anterior se tiene

$$\begin{aligned} \bar{J}_1 &= \int d\vec{r} \psi_{\vec{p}_1}^{\dagger} e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{r}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \left( \psi_{\vec{p}_2}^+ e^{i\vec{p}_2 \cdot \vec{r}} \right) \\ &= i \vec{p}_2 J_2 + \bar{K} \end{aligned} \quad (\text{III. 7})$$

donde

$$\bar{K} = \int d\vec{r} \psi_{\vec{p}_1}^* e^{i(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{q}) \cdot \vec{r}} \bar{V}_{\vec{r}} \psi_{-\vec{p}_2}^+ \quad (\text{III. 8})$$

Transformando Fourier para calcular  $\bar{K}$  obtenemos

$$\bar{K} = \bar{L} - i(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{q}) J_2 \quad (\text{III. 9})$$

con

$$\bar{L} = i \int d\vec{r} \vec{q} \tilde{\psi}_{\vec{p}_1}^*(\vec{q}) \tilde{\psi}_{-\vec{p}_2}^+(\vec{q} - \vec{p}_1 - \vec{p}_2 - \vec{q}) \quad (\text{III. 10})$$

Usando ahora (III. 4) se tiene, para el vector  $\bar{L}$

$$\bar{L} \approx 2i \tilde{V}(\vec{q}) \left[ \frac{\vec{p}_1}{(\vec{p}_2 + \vec{q})^2 - \vec{p}_2^2} + \frac{\vec{p}_1 + \vec{q}}{(\vec{p}_1 + \vec{q})^2 - \vec{p}_1^2} \right] \quad (\text{III. 11})$$

Reemplazando la última ecuación en ecuación en (III. 9), y ésta en (III. 7), nos queda, finalmente

$$\bar{J}_1 \approx -2i \tilde{V}(\vec{q}) \frac{\vec{q}}{(\vec{p}_1 + \vec{q})^2 - \vec{p}_1^2} \quad (\text{III. 12})$$

## APENDICE IV

## INTEGRALES DEL TIPO DE NORDSIECK CON FUNCIONES EIKONAL SIMETRICA

En este Apéndice deducimos las expresiones analíticas para las integrales

$$\bar{E}_1 = \int d\bar{r} e^{-i\bar{q}\cdot\bar{r}} e^{-\alpha r} E^*(Z, \bar{v}, \bar{r}) \bar{\nabla}_r E^+(Z, \bar{v}, \bar{r}) \quad (\text{IV. 1})$$

$$E_2 = \int d\bar{r} e^{-i\bar{q}\cdot\bar{r}} e^{-\alpha r} E^*(Z, \bar{v}, \bar{r}) E^+(Z, \bar{v}, \bar{r}) \quad (\text{IV. 2})$$

donde

$$E^\pm(Z, \bar{v}, \bar{r}) = e^{\mp i a \ln(vr \mp \bar{v}\cdot\bar{r})} = (vr \mp \bar{v}\cdot\bar{r})^{\mp i a} \quad (\text{IV. 3})$$

son las funciones que aparecen en la aproximación eikonal simétrica [118]. Hemos agregado el factor  $e^{-\alpha r}$  con el fin de garantizar la convergencia de las integrales. Al final del cálculo haremos  $\alpha \rightarrow 0$ .

Encontramos que la forma más simple de calcular estas integrales es expresándolas en términos de coordenadas parabólicas [129]. Estas coordenadas están definidas por

$$x = \sqrt{\xi \eta} \cos \psi \quad ; \quad y = \sqrt{\xi \eta} \sin \psi \quad ; \quad z = \frac{\xi - \eta}{2} \quad (\text{IV. 4})$$

y su relación con las coordenadas esféricas es

$$r = \frac{\xi + \eta}{2} \quad ; \quad \cos \theta = \frac{\xi - \eta}{\xi + \eta} \quad ; \quad \psi = \psi \quad (\text{IV. 5})$$

El elemento de volumen queda escrito como

$$d^3r = dx \, dy \, dz = \frac{\xi + \eta}{4} \, d\xi \, d\eta \, d\psi \quad (\text{IV. 6})$$

y los límites para integrar en todo el espacio son

$$\xi: 0 \rightarrow \infty \quad ; \quad \eta: 0 \rightarrow \infty \quad ; \quad \psi: 0 \rightarrow 2\pi \quad (\text{IV. 7})$$

Además podemos hacer un cambio de base, de

$(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \rightarrow (\hat{\xi}, \hat{\eta}, \hat{\psi})$  cuya transformación es

$$\begin{bmatrix} \hat{\xi} \\ \hat{\eta} \\ \hat{\psi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \psi & \sin \psi & \sqrt{\xi/\eta} \\ \cos \psi & \sin \psi & -\sqrt{\xi/\eta} \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{bmatrix} \quad (\text{IV. 8})$$

y entonces podemos escribir el gradiente en coordenadas y base vectorial parabólicas

$$\bar{\nabla} = \frac{2 \xi \eta}{\xi + \eta} \left( \hat{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} + \hat{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{1}{2} \frac{\xi + \eta}{\xi \eta} \hat{\psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \right) \quad (\text{IV. 9})$$

En coordenadas parabólicas las cantidades que aparecen en los integrandos de (IV. 1) y (IV. 2), se expresan de la siguiente manera:

$$(\vec{v} \cdot \vec{r} - \vec{v} \cdot \vec{r}) = v \eta \quad ; \quad \vec{v} \cdot \vec{r} + \vec{v} \cdot \vec{r} = v \xi$$

$$\bar{V}(E^+) = v^{-ia} (-2i) \frac{\sqrt{\xi\eta}}{\xi+\eta} \xi^{-ia-1} \hat{\xi} \quad (\text{IV. 10})$$

$$\vec{q} \cdot \vec{r} = -Q_{xy} \sqrt{\xi\eta} \cos(\psi - \psi_r) + q_z \frac{(\xi - \eta)}{2}$$

donde  $Q_{xy}$  es la proyección de  $\vec{q}$  sobre una dirección perpendicular a  $\vec{v}$ . En particular, para el caso de la sección 4.2, resulta  $Q_{xy} = \dot{P}_{xy} = K \sin \theta_r$ .  $\psi_r$  y  $\theta_r$  son las coordenadas angulares esféricas de  $\vec{q}$ , que no son variables de integración.

Para los cálculos que se realizan en esta Tesis (en la aproximación dipolar), es posible hacer  $\psi_r = 0$  en la expresión de  $\vec{q} \cdot \vec{r}$ .

i) CÁLCULO DE  $\bar{E}_1$

Esta es una integral vectorial. De las ecuaciones anteriores se tiene

$$\bar{E}_1 = \int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\eta \int_0^{2\pi} d\psi \left[ \left( -\frac{ia}{2} \right) v^{-2ia} \right] e^{-\beta\xi} e^{-\beta^*\eta} \xi^{-ia+\frac{1}{2}} \eta^{-ia+\frac{1}{2}}.$$

$$\cdot e^{i\psi \cos\psi} (\cos\psi \hat{x} + \sin\psi \hat{y} + \sqrt{\frac{\xi}{\eta}} \hat{z}) \quad (\text{IV. 11})$$

donde

$$\beta = \frac{\alpha + i q z}{2} \quad ; \quad s = Q_{xy} \sqrt{\epsilon \eta} \quad (\text{IV. 12})$$

Las integrales en  $\psi$  son similares a la integral (9.1.21) de Ref. 130. De esta integración resulta  $E_{1y} = 0$ . Luego conviene integrar en  $\eta$ . La integral es similar a la expresión 6.643.1 de Ref. 131. La última integración (en  $\xi$ ), es la integral 7.621.4, también de Ref. 131.

Finalmente se obtiene

$$E_{1x} = B \left[ i(1-ia) \frac{Q_{xy}}{2} \frac{1}{\beta^*} {}_2F_1(ia, 1-ia, 2t) \right] \quad (\text{IV. 13})$$

$$E_{1z} = B {}_2F_1(ia, 1-ia, t) \quad (\text{IV. 14})$$

donde

$$t = Q_{xy}^2 / (4|\beta|^2 + Q_{xy}^2) \quad (\text{IV. 15})$$

$$B = -4\pi i a 4^{-ia} \nu^{-2ia} \Gamma^2(1-ia) (4|\beta|^2 + Q_{xy}^2)^{-1+ia} \quad (\text{IV. 16})$$

$\Gamma$  son las funciones Gama [130,131] y  ${}_2F_1$  son las funciones hipergeométricas de una variable [130,131]. Para  $\alpha \rightarrow 0$  se tiene

$$\beta \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} \frac{i q_z}{2} \quad ; \quad 4|\rho|^2 + Q_{xy} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} q^2 \quad (\text{IV. 17})$$

con lo cual el resultado buscado es

$$E_{1x} = -C (1-ia) \frac{Q_{xy}}{q^2} {}_2F_1\left(ia, 1-ia, 2, \frac{Q_{xy}}{q^2}\right) \quad (\text{IV. 18})$$

$$E_{1z} = C {}_2F_1\left(ia, 1-ia, 1, \frac{Q_{xy}^2}{q^2}\right) \quad (\text{IV. 19})$$

donde

$$C = -4\pi i \frac{Z}{v q^2} \left(\frac{q^2}{4v^2}\right)^{-ia} r^2 (1-ia) \quad (\text{IV. 20})$$

La integral  $\bar{E}_1$  también puede ser calculada como límite de la integral  $\bar{J}_1$ , expresada en la ecuación (III. 1) del apéndice III, ya que

$$E^\pm(Z, \bar{v}, \bar{r}) = \lim_{m \rightarrow \infty} e^{\pm i(Z/v) \ln m} D^\pm(Z, m, \bar{v}, \bar{r}) \quad (\text{IV. 21})$$

donde

$$D^\pm(Z, m, \bar{v}, \bar{r}) = e^{a\pi/2} r (1 \mp ia) {}_1F_1(\pm ia, 1, \pm i v r - i \bar{v} \cdot \bar{r}) \quad (\text{IV. 22})$$

con  $a = Zm/v$

Numéricamente obtuvimos el mismo resultado en las dos formas.

Sin embargo, con las expresiones analíticas (IV.18) a (IV.20), se invierte un tiempo de cómputo menor.

## ii) CALCULO DE $E_2$

Esta es una integral escalar. Su expresión en coordenadas parabólicas es

$$E_2 = \frac{v^{-2ia}}{4} \int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\eta \int_0^{2\pi} d\psi (\xi + \eta) e^{-\beta\xi} e^{-\beta^*\eta} \xi^{-ia} \eta^{-ia} e^{i\psi \cos\psi} \quad \dots (IV.23)$$

donde usamos la misma notación que en el caso anterior. Las integrales son similares a las que se calcularon para  $\bar{E}_1$ , con lo cual fácilmente se llega al resultado

$$E_2 = \alpha A_1 (4|\beta|^2 + Q_{xy}^2)^{-2+ia} {}_2F_1(ia, 2-ia, 1, t) \quad (IV.24)$$

donde

$$A_1 = 8\pi v^{-2ia} 4^{-ia} \Gamma(1-ia) \Gamma(2-ia) \quad (IV.25)$$

Nuevamente si  $\alpha \rightarrow 0$ , se tienen las relaciones (IV.17), y la integral  $E_2$  se anula linealmente con  $\alpha$ .

Numéricamente, obtuvimos los mismos resultados que los que se obtienen calculando  $J_2$ , expresión (III.2), con el límite (IV.21). También en este caso el tiempo de cómputo es menor



cuando se consideran las expresiones analíticas (IV.24) y (IV.25).

## APENDICE V

## FACTORES DE FORMA E INTEGRALES RELACIONADAS

El factor de forma  $F_f$  y el vector  $\bar{R}$  se definen por

$$F_f = \int d\bar{r} \psi_f^*(\bar{r}) e^{i\bar{q} \cdot \bar{r}} \psi_i(\bar{r}) \quad (V.1)$$

$$\bar{R} = \int d\bar{r} \psi_f^*(\bar{r}) e^{i\bar{q} \cdot \bar{r}} \bar{\nabla}_{\bar{r}} (\psi_i(\bar{r})) \quad (V.2)$$

donde  $\psi_{i,f}$  son funciones de onda electrónicas. La tabla siguiente muestra su forma explícita para algunas transiciones hidrogénicas particulares. Usamos la notación  $d = (q/z)^2$

$$\underline{1S - 2S} \quad F_f = \frac{4\sqrt{2} d}{(2.25 + d)^3} \quad ; \quad \bar{R} = \frac{i 2\sqrt{2} \bar{q} (3/4 - d)}{(2.25 + d)^3}$$

$$\underline{1S - 2P_0} \quad F_f = \frac{12 i q_z / z}{\sqrt{2} (2.25 + d)^3} \quad ; \quad \bar{R} = -\frac{2z}{\sqrt{2}} \frac{\left[ \hat{z} - \frac{4q_z \cdot \bar{q}}{z^2 (2.25 + d)} \right]}{(2.25 + d)^3}$$

$$\underline{1S - 2P_{\pm 1}} \quad F_f = \mp \frac{i 6}{z} \frac{(q_x \mp i q_y)}{(2.25 + d)^3} \quad ; \quad \bar{R} = \mp \frac{i z}{(2.25 + d)^2} \left[ i \hat{x} \pm y - \frac{4\bar{q} [i q_x \mp q_y]}{2(2.25 + d)} \right]$$

$$\underline{15-35} \quad F_f = \frac{32}{9\sqrt{3}} \frac{1}{(1.77+d)^2} \left[ 1 - \frac{1}{2} \frac{\left(\frac{16}{3} - d\right)}{(1.77+d)} + \frac{8}{9} \frac{(d - 1.77)}{(1.77+d)^2} \right]$$

$$\bar{R} = \frac{i 8}{3\sqrt{3}} \frac{\bar{q}}{(1.77+d)^2} \left[ -1 + \frac{32}{9} \frac{1}{(1.77+d)} - \frac{8\left(\frac{80}{9} - d\right)}{27(1.77+d)^2} \right]$$

$$\underline{15-15} \quad F_f = \frac{16}{(4+d)^2} \quad ; \quad \bar{R} = \frac{-i 8 \bar{q}}{(4+d)}$$

$$\underline{25-25} \quad F_f = \frac{1 - 3d + 2d^2}{(1+d)^4} \quad ; \quad \bar{R} = \frac{-i \bar{q}}{2(1+d)^2} \left[ 2 - \frac{11}{2(1+d)} + \frac{3}{2} \frac{(3-d)}{(1+d)^2} \right]$$

$$\underline{2p_0-2p_0} \quad F_f = \frac{1}{(1+d)^3} \left[ 1 - \frac{6 q_z^2}{z^2(1+d)} \right]$$

$$\bar{R} = -\frac{i \left[ 1 - \frac{6 q_z^2}{z^2(1+d)} \right]}{2 (1+d)^3} \bar{q}$$

## REFERENCIAS

- [1] R. Anholt, Rev. Mod. Phys. 57, 995 (1985)
- [2] H. W. Schnopper, H. D. Betz, J. P. Delvaille, K. Kalata,  
A. R. Sohval, K. W. Jones y H. E. Wegner, Phys. Rev. Lett. 29,  
898 (1972)
- [3] H. A. Bethe y E. E. Salpeter, "Quantum Mechanics of One- and  
Two-electron atoms". (Springer Verlag) (1957). Sec. 75
- [4] A. R. Sohval, J. P. Delvaille, K. Kalata y H. W. Schnopper,  
J. Phys. B 8, L426 (1975)
- [5] D. H. Jakubassa y M. Kleber, Z. Phys. A 273, 29 (1975)
- [6] R. Anholt y T. K. Saylor, Phys. Lett. 56 A, 455
- [7] R. Shakeshaft y L. Spruch, J. Phys B 11, L621 (1978)
- [8] M. L. Martiarena y C. R. Garibotti, Phys. Lett. 113 A,  
307 (1985)
- [9] M. Ya Amusia, Comments At. Mol. Phys. 11, 123 (1982)
- [10] K. Ishii y S. Morita, Phys. Rev. A 30, 2278 (1984)
- [11] K. Ishii y S. Morita, Phys. Rev. A 31, 1168 (1985)
- [12] D. Mihalas, "Stellar Atmospheres", (W. H. Freeman, San  
Francisco) (1970). pag. 253
- [13] C. Pecker-Wimel, "Introduction a la Spectroscopie des  
Plasmas". (Gordon-Breach) (1967). Capitulo V.
- [14] El planteo del Hamiltoniano con campo de radiación puede  
verse en varios textos, por ejemplo J. D. Bjorken y  
S. D. Drell, "Relativistic Quantum fields", (Mc Graw Hill)  
(1965). Capítulos 11 y 12.

- [15] Los pasos intermedios pueden verse en la Ref. anterior o más detalladamente en: M.C.Pacher, Tesis de Licenciatura en Física, Universidad de Buenos Aires, Argentina (1985)
- [16] Se denominan efectos de retardación a los que provienen de considerar el momento del fotón distinto de cero. Véase por ejemplo Ref. 3 sección 59.
- [17] Uno de los primeros en hacer notar que el impulso del fotón produce apartamientos de la distribución simétrica, en las colisiones, fue Fermi. Véase por ejemplo su trabajo de revisión; E.Fermi, Rev. Mod. Phys. 4, 87 (1932), en el cual se muestra la influencia del efecto Doppler en la emisión continua (pág. 105).
- [18] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu y F.Lalöe, "Quantum Mechanics", (John Wiley) (1977). Pág. 1301.
- [19] Puede hacerse una estimación de la validez de la aproximación dipolar de la siguiente forma: la diferencia  $|\bar{x}_m - \bar{x}|$  puede pensarse del orden del tamaño atómico, entonces  $|\bar{k}|$  debe ser menor que 1. Como  $\omega = k.c$ , debe ser  $\omega < 137 \simeq 4 \text{ Kev}$ .
- [20] Se denominan rayos x duros a los que tienen energías por encima de 10 Kev, aproximadamente, y blandos a los que están por debajo de esta energía.
- [21] Véase Ref. 3 pág. 308
- [22] M.L.Goldberger y K.M.Watson, "Collision Theory", (John Wiley) (1964)
- [23] M.C.Pacher, A.D.González y J.E.Miraglia, aceptado para su

- publicación en Phys. Rev. A (1987)
- [24] R. Shakeshaft y L. Spruch, Phys. Rev. Lett. 38, 175 (1977)
- [25] K. Alder, A. Bohr, T. Huus, B. Mottelson y A. Winther,  
Rev. Mod. Phys. 28, 487 (1956)
- [26] K. Hino, N. Toshima, I. Shimamura y T. Watanabe, Comunicación  
privada (1985)
- [27] F. Folkmann, C. Gaarde, T. Huus y K. Kemp, Nucl. Inst. Meth.  
116, 487 (1974)
- [28] Esta aproximación ha sido usada en colisiones de electrones  
con átomos. Véase por ejemplo D. H. Bransden, "Atomic  
Collision Theory". (W. A. Benjamin, NY) (1970). Pág. 252
- [29] Como el ISB es de interés en la región de los rayos  $x$  duros,  
lo que principalmente proviene de distancias internucleares  
cortas, una mejor aproximación para  $Z_N$  podría ser  $Z_N = Z_p \cdot Z_T$
- [30] A. Nordsieck, Phys. Rev. 93, 785 (1954)
- [31] J. P. Coleman, en "Case Studies in Atomic Collision  
Physics I", editado por E. W. McDaniel y M. R. C. McDowell,  
(North Holland) (1969) pág. 161.
- [32] Ver Ref. 3, sec. 77
- [33] W. Heitler, "The Quantum Theory of Radiation". (Oxford  
University Press) (1954). Sec. 21
- [34] Un trabajo de revisión acerca de recombinación con moléculas  
es el de D. R. Bates, Adv. At. Mol. Phys. 15, 235 (1979)
- [35] M. Stobbe, Ann. d. Phys. 7, 661 (1930).
- [36] E. C. G. Stueckelberg y P. M. Morse, Phys. Rev. 35, 116 (1930).  
Ver además Ref. 3 sección 75.

- [37] W. Wessel, Ann. d. Phys. 5, 611 (1930).
- [38] F. Sauter, Ann. d. Phys. 11, 454 (1931)
- [39] V. V. Ivanov, "Radiative Transfer and the Spectra of Celestial Bodies". (National Bureau of Standards) (1973). Cap. I.
- [40] Véase por ejemplo la sección 4.1 del trabajo de revisión de C. De Michelis y M. Mattioli, Nucl. Fusion 21, 677 (1981)
- [41] A. Burgess, Mem. R. Astron. Soc. 69, 1 (1964)
- [42] K. Dettmann, Springer Tracts Mod. Phys. 58, 119 (1971)
- [43] G. Raisbeck y F. Yiou, Phys. Rev. A 4, 1858 (1971)
- [44] P. Kienle, M. Kleber, B. Povh, R. M. Diamond, F. S. Stephens, E. Grosse, M. R. Maier y D. Proetel, Phys. Rev. Lett. 31, 1099 (1973)
- [45] J. Lindskog, J. Phil, R. Sjordin, A. Mareliaus, K. Sharma y R. Hallim, Phys. Scripta 14, 100 (1976)
- [46] Un trabajo de revisión experimental donde se trata además REC en baja energía es el de H. D. Betz, F. Bell, E. Spindler, M. Kleber, H. Panke y W. Stehling, Beam Foil Spectr. 2, 461 (1976)
- [47] Un trabajo experimental con blancos sólidos, analizado con perfiles de Compton empíricos, puede verse en: E. Spindler, H. D. Betz y F. Bell, J. Phys. B 10, L561 (1977).
- [48] J. A. Tanis y S. M. Shafroth, Phys. Rev. Lett. 40, 1174 (1978)
- [49] J. A. Tanis, S. M. Shafroth, J. E. Willis y J. L. Mowat, Phys. Rev. A 23, 366 (1981)
- [50] A. R. Sohval, J. P. Delvaille, K. Kalata, K. Kirby-Docken y H. W. Schnopper, J. Phys. B 9, L25 (1976)

- [51] K. Kawatsura, H. Tawara y Patrick Richard, IEEE Trans. Nucl. Sc. NS-28, 1053 (1981)
- [52] H. Tawara, Patrick Richard y K. Kawatsura, Phys. Rev. A 26, 154 (1982)
- [53] H. Gould, D. Greiner, P. Lindstrom, T. J. M. Symons y H. Crawford, Phys. Rev. Lett. 52, 180 (1984)
- [54] R. Anholt, S. A. Andriamonje, E. Morenzoni, Ch. Stoller, J. D. Molitoris, W. E. Meyerhof, H. Bowman, J. S. Xu, Z. Z. Xu, J. O. Rasmussen y D. H. H. Hoffmann, Phys. Rev. Lett. 53, 234 (1984)
- [55] R. Anholt, S. A. Andriamonje, E. Morenzoni, Ch. Stoller, J. D. Molitoris, W. E. Meyerhof, H. Bowman, J. S. Xu, Z. Z. Xu, J. O. Rasmussen, K. Frankel, D. Murphy, K. Crowe y D. H. H. Hoffmann, Phys. Rev. A 30, 2232 (1984)
- [56] R. Anholt, Ch. Stoller, J. D. Molitoris, D. W. Spooner, E. Morenzoni, S. A. Andriamonje, W. E. Meyerhof, H. Bowman, J. S. Xu, Z. Z. Xu, J. O. Rasmussen y D. H. H. Hoffmann, Phys. Rev. A 33, 2270 (1986)
- [57] C. M. Lee, L. Kissel, R. H. Pratt y H. K. Tseng, Phys. Rev. A 13, 1714 (1976)
- [58] H. D. Betz, F. Bell, H. Panke, W. Stehling, E. Spindler y M. Kleber, Phys. Rev. Lett. 34, 1256 (1975)
- [59] F. Bell, H. D. Betz, H. Panke, E. Spindler, W. Stehling y M. Kleber, Phys. Rev. Lett. 35, 841 (1975)
- [60] J. S. Briggs y K. Dettmann, Phys. Rev. Lett. 33, 1123 (1974) 487 (1974)



- [61] M. Kleber y D. H. Jakubassa, Nuclear Phys. A 252, 152 (1975)
- [62] C. M. Lee, Phys. Rev. A 17, 566 (1977).
- [63] J. S. Briggs y K. Dettmann, J. Phys. B 10, 1113 (1977)
- [64] M. Gorriz, J. S. Briggs y S. Alston, J. Phys. B 16, L665 (1983)
- [65] D. H. Jakubassa-Amundsen, R. Hoppler y H. D. Betz, J. Phys. B 17, 3943 (1984)
- [66] A. D. González y J. E. Miraglia, Phys. Rev. A 30, 2292 (1984)
- [67] J. E. Miraglia, C. R. Garibotti y A. D. González, Phys. Rev. A 32, 250 (1985)
- [68] Una comparación entre varias aproximaciones puede verse en:  
J. E. Miraglia, Phys. Rev. A 32, 1789 (1985)
- [69] F. Sauter, Ann. d. Phys. 11, 454 (1931)
- [70] Por ejemplo véase Ref. 53, en donde se muestran resultados  
de la colisión  $U^{92+} + T_a$
- [71] R. Shule, H. Schmidt-Bocking y I. Tserruya, J. Phys. B 10, 889 (1977)
- [72] E. Spindler, H. D. Betz y F. Bell, Phys. Rev. Lett. 42, 832 (1979)
- [73] R. D. Rivarola y J. E. Miraglia, J. Phys. B 15, 2221 (1982)
- [74] J. E. Miraglia, R. D. Piacentini, R. D. Rivarola y A. Salin,  
J. Phys. B 14, L197 (1981)
- [75] En particular la aproximación OBK no tiene ángulos críticos  
y no explica el pico de Thomas, que ha sido observado  
experimentalmente. Véase Ref. 42
- [76] R. Shakeshaft y L. Spruch, Rev. Mod. Phys. 51, 369 (1979)
- [77] Una explicación detallada del término cuadrupolar para la

interacción gravitatoria y algunas diferencias con el campo electromagnético puede verse en el libro de C.W. Misner, K.S. Thorne y J.A. Wheeler. "Gravitation". (Freeman and Co. San Francisco) (1973), sec 36.1.

[78] También puede verse un resumen de propiedades del campo de radiación gravitatorio en C.M. Will. "Theory and Experiment in Gravitational Physics". (Cambridge Univ. Press) 1981, tabla 10.2

[79] Se reduce a integrales de Nordsieck. Véase por ejemplo el libro de Ref. 31.

[80] Ref. 33, sección 21.3

[81] J.E. Miraglia, J. Phys. B 15, 4205 (1982). Véase también Ref. 31, cap. 3

[82] I.M. Cheshire, Proc. Phys. Soc. London 84, 89 (1964)

[83] Clementi y Roetti, Atomic Data and Nuclear Data Tables 14, 179 (1974)

[84] M.R. Flannery, Phys. Rev. 183, 231 (1969)

[85] Segun Kienle y col. el ión de Ar tiene una carga promedio de 17. Estos autores explican que el ión de Ar pierde sus electrones al atravesar la ventana de entrada a la cámara de colisión. Esta carga, entonces, no surge de una medida, sino de un cálculo standard en "stripper".

[86] I. Nemirovsky. Comunicación privada (1986)

[87] La falta de conocimiento preciso del estado de carga de los iones incidentes ya fue notado por los autores de Ref. 52. Este es el motivo por el cual ellos hacen un análisis

cuidadoso con iones de  $F^{8+}$  y  $F^{9+}$

- [88] J. Macek y S. Alston, Phys. Rev. A 26, 250 (1982)
- [89] Un resumen de la SPB puede verse en: J. M. Maidagan,  
Tesis de Doctorado en Física. Universidad Nacional de  
Rosario, Argentina. (1986). Pág. 40
- [90] Puede verse que, con funciones de onda hidrogénicas y con  
las cargas efectivas usadas en Ref. 65, la sección eficaz  
en el máximo del espectro baja aproximadamente a la mitad.
- [91] D. P. Dewangan y J. Eichler, J. Phys. B 18, L65 (1985)
- [92] J. H. McGuire, J. Phys. B 18, L75 (1985)
- [93] R. D. Barrachina, C. R. Garibotti y J. E. Miraglia,  
Phys. Rev. A 31, 4026 (1985)
- [94] L. H. Thomas, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A 114, 561 (1927)
- [95] E. Horsdal-Pedersen, Ph. D. Thesis, Universidad de Aarhus.  
Dinamarca. (1983).
- [96] E. Horsdal, B. Jensen y K. O. Nielsen, Phys. Rev. Lett. 57,  
1414 (1986)
- [97] D. R. Bates y R. A. Mapleton, Proc. Phys. Soc. Lond. 87,  
657 (1966)
- [98] J. R. Oppenheimer, Phys. Rev. 31, 349 (1928)
- [99] J. S. Brinkman y H. A. Kramers, Proc. K. Ned. Akad. Wet. 33,  
973 (1930)
- [100] J. D. Jackson y H. Schiff, Phys. Rev. 89, 359 (1953)
- [101] R. M. Drisko, Ph. D. Thesis, Carnegie Institute of Technology  
(1955)
- [102] Esta correspondencia entre el orden perturbativo y las

interacciones se entiende claramente en el formalismo de integral de camino. Ver por ejemplo "Quantum Mechanics and Path Integrals", R.P. Feynman y A.R. Hibbs, (Mc Graw-Hill) (1965).

- [103] Un trabajo de revisión sobre captura desde el punto de vista de las aproximaciones de onda distorsionada puede verse en Dz. Belkic, R. Gayet y A. Salin, Phys. Rep. 56, 279 (1979)
- [104] R. Anholt, Phys. Rev. A 31, 3579 (1985)
- [105] Esto no sucede con proyectiles y blancos pesados. Vease por ejemplo Ref. 56 donde se bombardea con iones  $Xe^{54+}$  sobre blancos pesados. El pico de REC, situado en la región de los rayos x duros, sobresale claramente del fondo.
- [106] E. Horsdal-Pedersen, C.L. Cocke y M. Stockli, XIII ICPEAC, Berlin, 1983, editado por J. Eichler, W. Fritsch, I. V. Hertel, N. Stoterfoht y U. Will. (North-Holland, Amsterdam) pág. 478 (1983).
- [107] T. C. Chu, K. Ishii, A. Yamadera, M. Sebata y S. Morita, Phys. Rev. A 24, 1720 (1981)
- [108] Puede haber también procesos precolisionales, por ejemplo en colisiones en presencia de campos Laser.
- [109] F. Folkmann, J. Borggreen y A. Kjeldgaard, Nucl. Inst. Meth. 119, 117 (1974)
- [110] K. Ishii, S. Morita y H. Tawara, Phys. Rev. A 13, 131 (1976)
- [111] K. Ishii, M. Kamiya, K. Sera, S. Morita y H. Tawara, Phys. Rev. A 15, 2126 (1977)

- [112] A. Yamadera, K. Ishii, K. Sera, M. Sebata y S. Morita,  
Phys. Rev. A 23, 24 (1981)
- [113] T. C. Chu, K. Ishii, A. Yamadera, M. Sebata y S. Morita,  
Nucl. Inst. Meth. 190, 395 (1981)
- [114] F. Folkmann, K. M. Cramon y N. Hertel, Nucl. Inst. Meth. B3,  
11 (1985)
- [115] En la mayor parte de los trabajos de Astrofísica no se  
tiene en cuenta este proceso. Véase por ejemplo Paul  
Richiazzi y Richard Canfield, Ap. J. 272, 739  
(1983) (pág 741 ).
- [116] J. M. Maidagan, R. D. Piacentini y R. D. Rivarola,  
Phys. Lett. 88A, 137 (1982)
- [117] Un tratamiento muy detallado de la SE puede verse en la  
Tesis de Ref. 89. Capítulo 3.
- [118] C. O. Reinhold y J. E. Miraglia, Aceptado para su publicación  
en J. Phys. B (1986)
- [119] G. R. Deco, P. D. Fainstein y R. D. Rivarola, J. Phys. B 19, 213  
(1986)
- [120] Las expresiones deducidas aquí en realidad son de  
aplicación mas general, son las mismas para CDW y para las  
aproximaciones "peaking" de onda distorsionada, cambiando  
adecuadamente las funciones de distorsión. Véase el  
artículo de A. D. González, J. E. Miraglia y C. R. Garibotti,  
Phys. Rev. A 34, 2834 (1986)
- [121] J. I. Casaubón, Tesis de Doctorado en Física. Universidad de  
Buenos Aires, Argentina. (1985). Pág. 41-44

- [122] K. Ozawa, J. H. Chang, Y. Yamamoto, S. Morita y K. Ishii,  
Phys. Rev. A 33, 3018 (1986)
- [123] En REC, al considerar el impulso del fotón, la asimetría  
del bremsstrahlung electrónico es compensada por el  
bremsstrahlung del centro de masa, resultando una  
distribución simétrica hasta velocidades menores  
aproximadamente a  $c/3$ . Véase el artículo de Ref. 23.
- [124] H. W. Schnopper, J. P. Delvaille, K. Kalata, A. R. Sohval,  
M. Abdulwahab, K. W. Jones y H. E. Wegner, Phys. Lett. 47A,  
61 (1974)
- [125] R. Brendle, R. Gayet, J. P. Rozet y Wohrer,  
Phys. Rev. Lett. 54, 2007 (1985)
- [126] M. R. C. Mc Dowell y J. P. Coleman. "Introduction to the  
Theory of Ion-Atom Collisions". (North Holland) (1970).  
Pág. 315
- [127] Mas relaciones entre las coordenadas pueden verse en el  
Apéndice 1 de Ref. 15
- [128] Ref. 3 sección 9
- [129] Véase por ejemplo L. D. Landau y E. M. Lifshitz, "Mecánica  
Cuántica". Vol. 3 del Curso de Física Teórica.  
(Reverté. Barcelona) (1972). Sección 37.
- [130] M. Abramowitz y I. Stegun, "Handbook of Mathematical  
Functions" (National Bureau of Standards) (1972)
- [131] I. S. Gradshteyn y I. M. Ryzhik, "Table of Integrals, Series  
and Products". (Academic Press) (1980)

## DESCRIPCION DE LAS FIGURAS

Figura 1: Sistemas de coordenadas usados para la descripción del problema de tres cuerpos.

Figura 2: a) Esquema de la recombinación radiativa (RR)  
b) Esquema de la captura electrónica radiativa (REC)

Figura 3: Sección eficaz diferencial para rayos x asociados con el proceso de captura electrónica radiativa (REC), medidos a  $90^\circ$  respecto del haz incidente, para la colisión



a 7 Mev/nucl de energía incidente. ( $v = 16.7$  u.a.)

———— resultados teóricos obtenidos en este trabajo

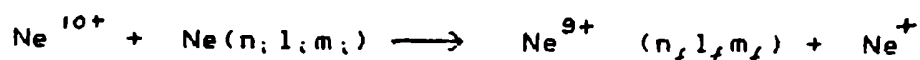
----- resultados teóricos previos de Ref. 44

— · — · — resultados teóricos previos de RECC (Ref. 8)

• • • • resultados experimentales de Ref. 44

En la parte a) de la figura se muestra la contribución de cada capa y en b) la suma normalizada a los datos experimentales.

Figura 4: Igual a la figura 3, para la colisión



a 7 Mev/nucl de energía incidente.

Figura 5: Igual a la figura 3 para la colisión

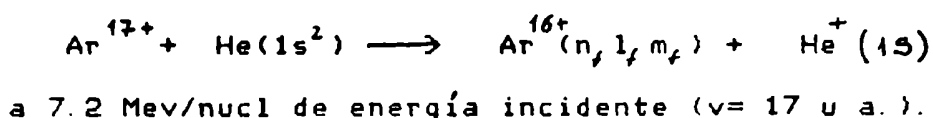


Figura 6 a) Sección eficaz diferencial en función de la energía de los fotones emitidos para la colisión



para una velocidad del proyectil de 12.5 u.a.

IA indica el cálculo teórico de REC en la aproximación impulso. SPB indica el cálculo de REC en la aproximación de Born del potencial fuerte. La línea en forma de histograma son los resultados experimentales. Todos los resultados de esta figura son de Jakubassa y col. [65]

b) Sección eficaz diferencial en función de la energía de los fotones emitidos, para la colisión



para una velocidad del proyectil de 12.5 u.a. Los resultados experimentales son los mismos que en la figura 6a (histograma). Todas las curvas son resultados obtenidos en este trabajo con la aproximación impulso y con una descripción hidrogénica del blanco, con cargas efectivas 4.77, 2.43 y 1.58 para los orbitales 1s, 2s, 2p. Se



muestra la contribución de cada orbital del blanco, con la siguiente notación:

..... electrón capturado desde el 1s del Carbono

----- electrón capturado desde el 2s del Carbono

----- electrón capturado desde el 2p del Carbono

La línea llena es la suma de todas las contribuciones

c) La misma notación que en la figura 6b) pero con una descripción del blanco con funciones

Roothann-Hartree-Fock según Clementi-Roetti [83].

d) La misma notación que en la figura 6b) pero con una descripción del blanco con funciones tipo 1s para todos los electrones del blanco, incluso los de valencia, y cargas efectivas 5.62 y 1.78 (ref. 65) para la capa interna y para la de valencia, respectivamente.

Figura 7: Sección eficaz total para la colisión



como una función de la energía del proyectil en Mev.

REC-CDW indica el cálculo de captura electrónica radiativa en la aproximación de onda distorsionada del continuo (ecuación (3.31))

RR-rel indica el resultado del modelo binario relativista (ecuación (3.16))

MEC-CDW indica la sección eficaz para el proceso sin emisión de radiación, calculada en la aproximación CDW, según la ecuación (3.41)

MEC- $v^{-12}$  indica la sección eficaz de captura sin emisión de radiación, calculada en la segunda aproximación de Born (ecuación (3.39)), en donde no se tuvo en cuenta el término dependiente de  $v^{-12}$

Figura 8: Igual que en la Figura 7 pero para la colisión



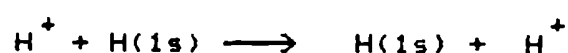
Indicado como REC-asint se ha agregado el resultado de la ecuación (3.15)

Figura 9: Diagrama esquemático en velocidad del proyectil y carga del blanco, para indicar la zona de predominio de cada mecanismo. Se consideró la colisión



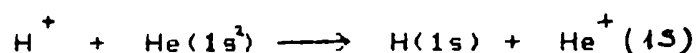
La curva corresponde a la ecuación (3.44)

Figura 10: Sección eficaz diferencial para la colisión



como función del ángulo de dispersión del proyectil en el centro de masa, para energías de impacto de 5 y 10 Mev. La notación es la misma que en la Figura 7.

Figura 11: Sección eficaz diferencial para la colisión



como una función del ángulo de dispersión del proyectil en el laboratorio y para una energía de los protones incidentes de 7.4 Mev. La notación es la misma que en la Figura 7. Los puntos representan los datos experimentales obtenidos por Horsdal-Pedersen y col. [106]

Figura 12: Emisión de radiación continua a  $90^\circ$  respecto de la dirección del haz, para protones de 1 Mev incidiendo sobre un blanco de Al, como función de la energía del fotón. Las líneas sólidas indican los resultados obtenidos en este trabajo: dispersión elástica radiativa (REL) proveniente de tres orbitales del Al; 1s, 2s y 2p, y bremsstrahlung intersistema (ISB) dado por la ecuación (2.34). Los puntos indican los resultados experimentales de Ishii y Morita [10, 110] y en líneas de trazos se muestran los resultados teóricos de estos autores: SEB, RI y AB

Figura 13: Idem figura 12 pero para protones de 4 Mev.

Figura 14: Distribución angular de rayos x para la colisión de protones de 1.5 Mev sobre Aluminio, integrado sobre la energía del fotón entre 5.18 y 5.57 Kev y normalizado al valor en  $90^\circ$ . La línea sólida es el

resultado obtenido en este trabajo para REL 1s-1s. La línea de trazos es el resultado teórico de Ishii y Morita [10], y los puntos su resultado experimental.

Figura 15: Distribución angular de rayos x para la colisión de protones de 0.5 Mev sobre Aluminio, integrado sobre la energía del fotón entre 2.85 y 3.00 Kev y normalizado al valor en  $90^\circ$ . La línea sólida es el resultado obtenido en este trabajo para REL 1s-1s. La línea de trazos es el resultado teórico de Ozawa y col. y los puntos su resultado experimental [122]

Figura 16: Sección eficaz triple diferencial de emisión continua como una función de la carga del proyectil, para cuatro energías distintas de los iones incidentes sobre átomos de Hidrógeno. La energía del fotón emitido es 27.2 ev y el ángulo de emisión  $90^\circ$ . Las líneas sólidas son los resultados obtenidos en este trabajo para REL 1s-1s y las líneas de trazos representan el comportamiento  $Z_p^2$ .

Figura 17: Espectro correspondiente a la desexcitación radiativa al nivel fundamental para átomos de hidrógeno bombardeados por protones de 100 Kev.

Figura 18: Espectro correspondiente a la excitación radiativa

desde el estado fundamental de átomos de hidrógeno por impacto de protones de 100 Kev.

Figura 19: Sección eficaz simple diferencial normalizada a  $\omega^2 d\omega$ , como una función de la energía del fotón en el rango  $\omega < 0$  y  $\omega > 0$ , según la cantidad (4.12). En línea llena se representan resultados para excitación radiativa y en línea de puntos REL 1s-1s, ambos para átomos de hidrógeno bombardeados por protones de 100 Kev.

Figura 20: Sección eficaz total para excitación radiativa de H(1s) como función de la energía de los protones incidentes.

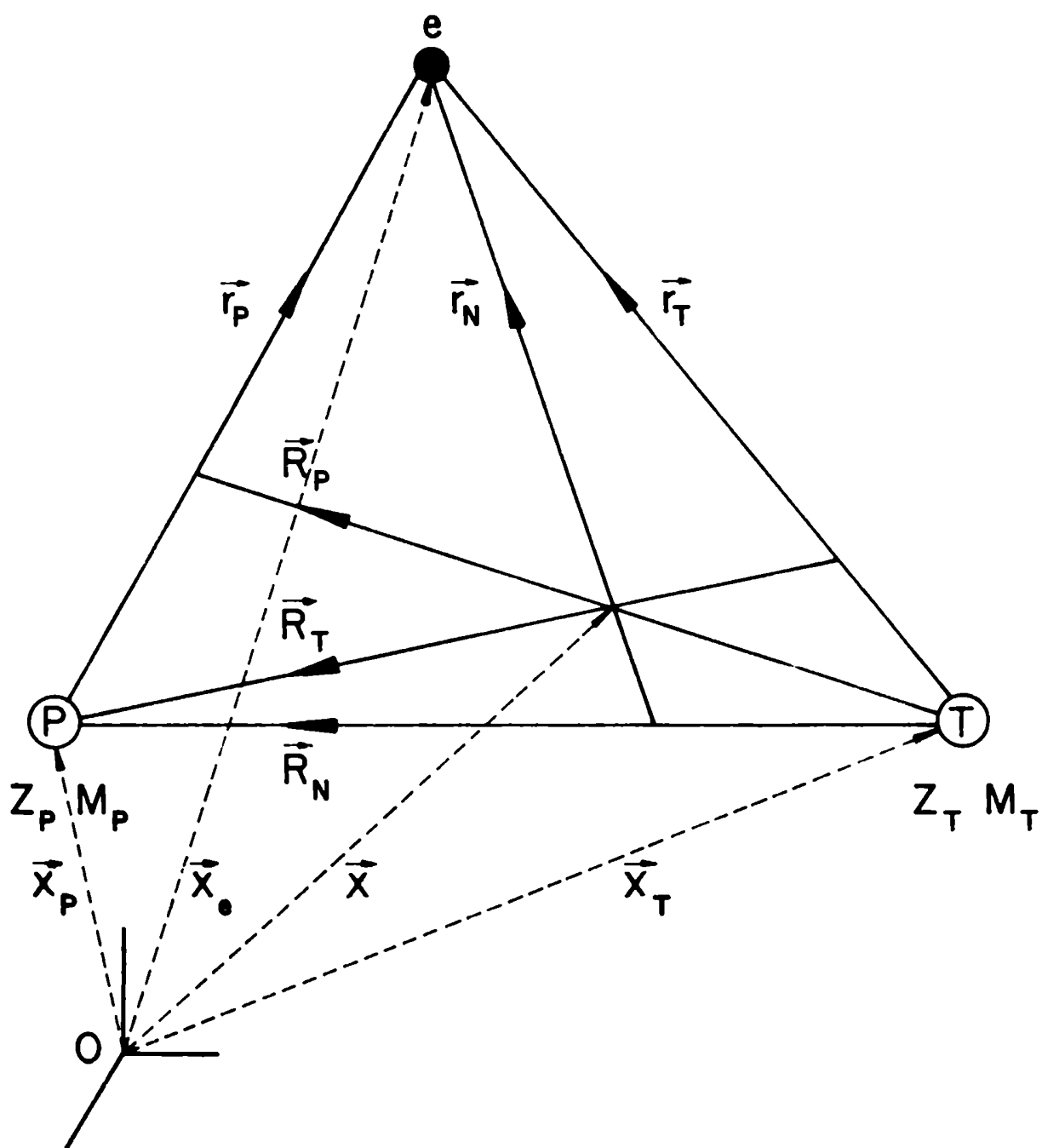
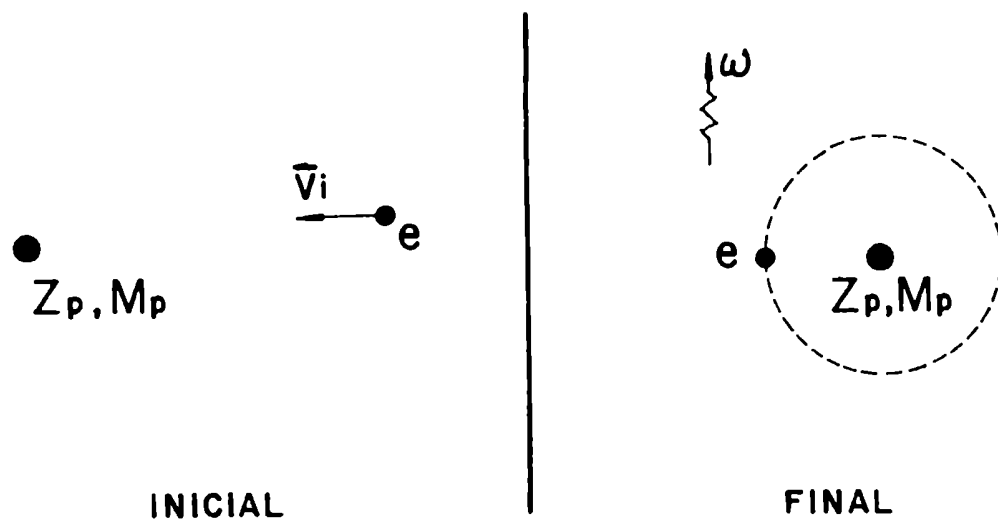
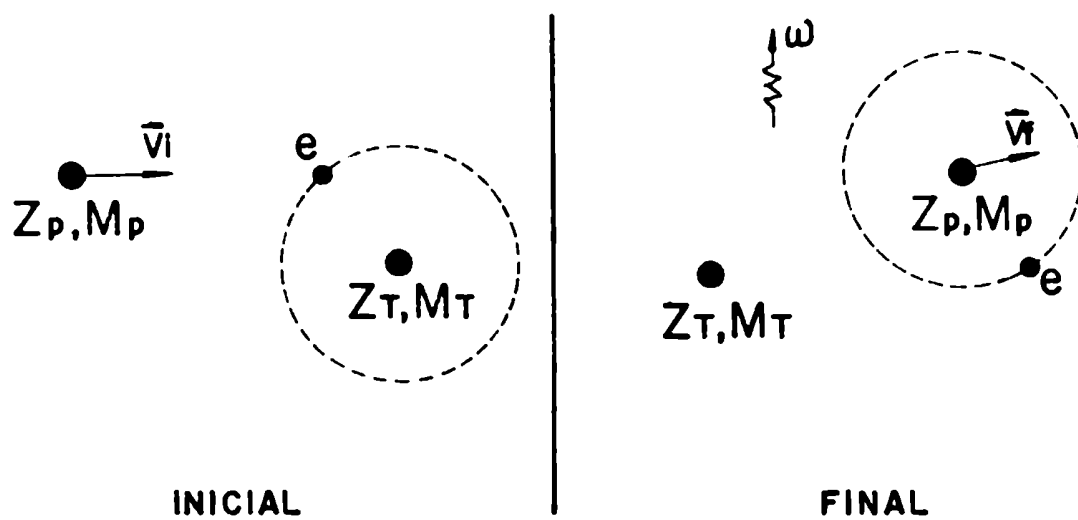


FIGURA I



d) DIAGRAMA ESQUEMATICO DE RR



b) DIAGRAMA ESQUEMATICO DE REC

FIGURA 2

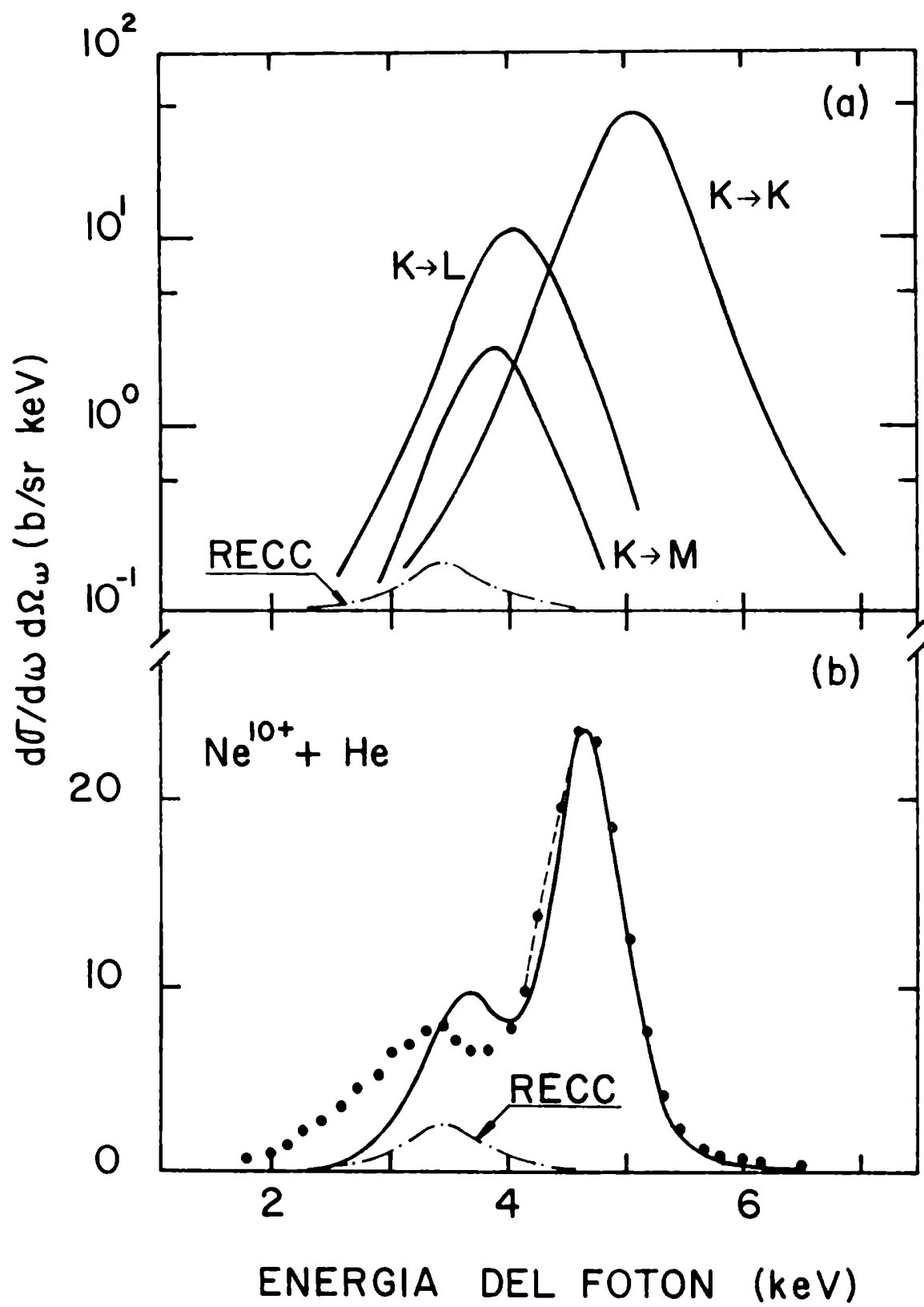


FIGURA 3



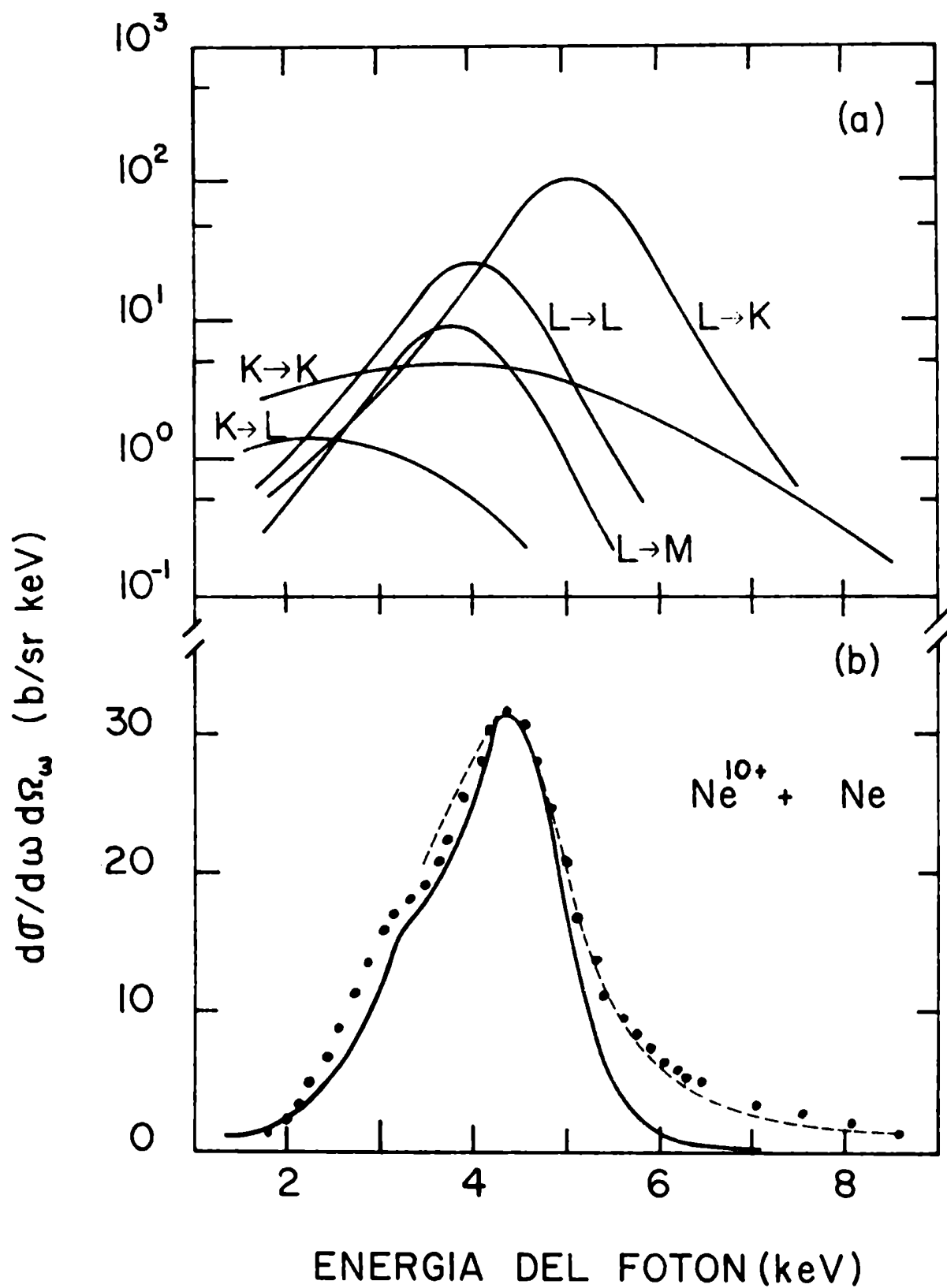


FIGURA 4

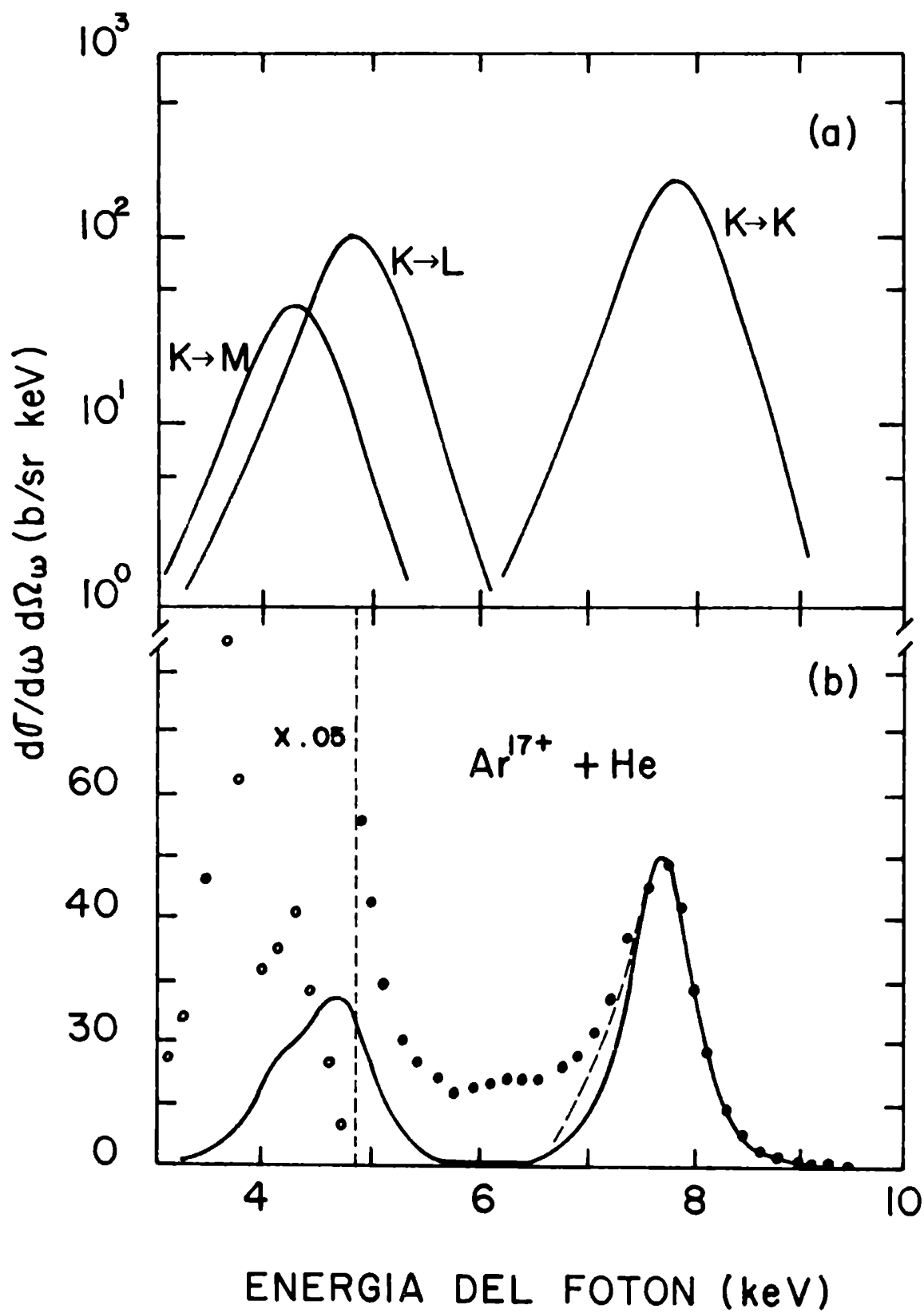


FIGURA 5

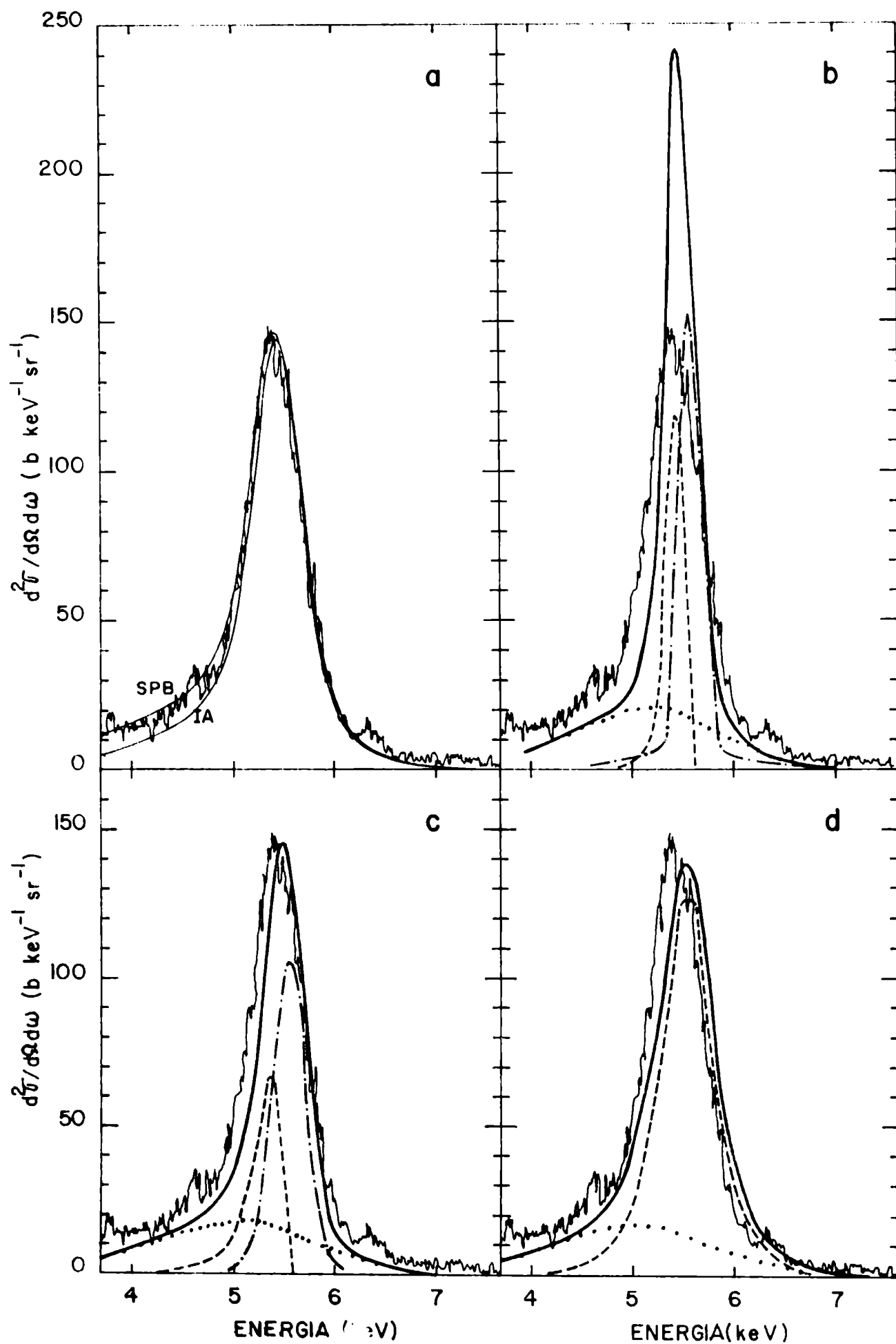


FIGURA 6

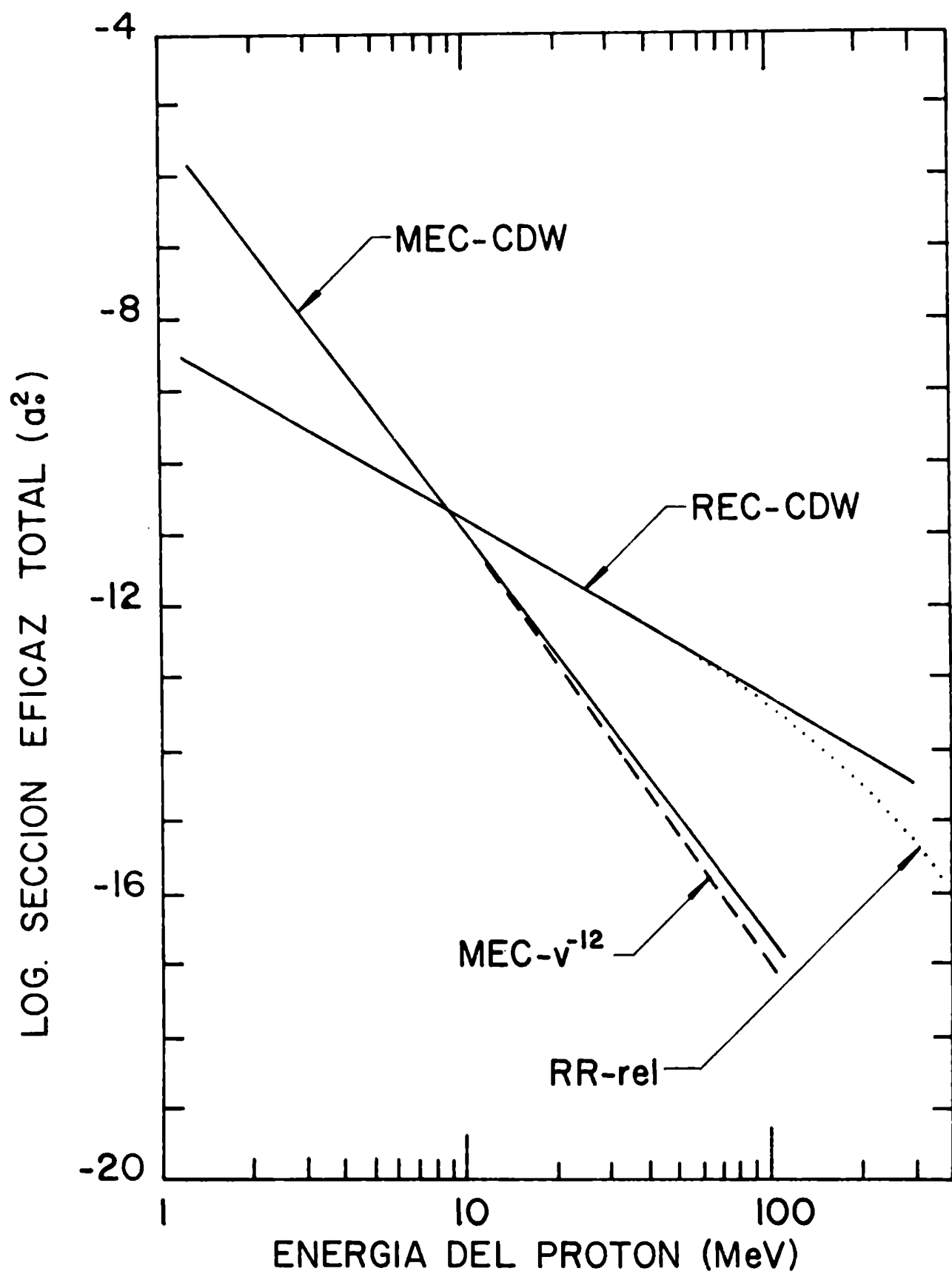


FIGURA 7

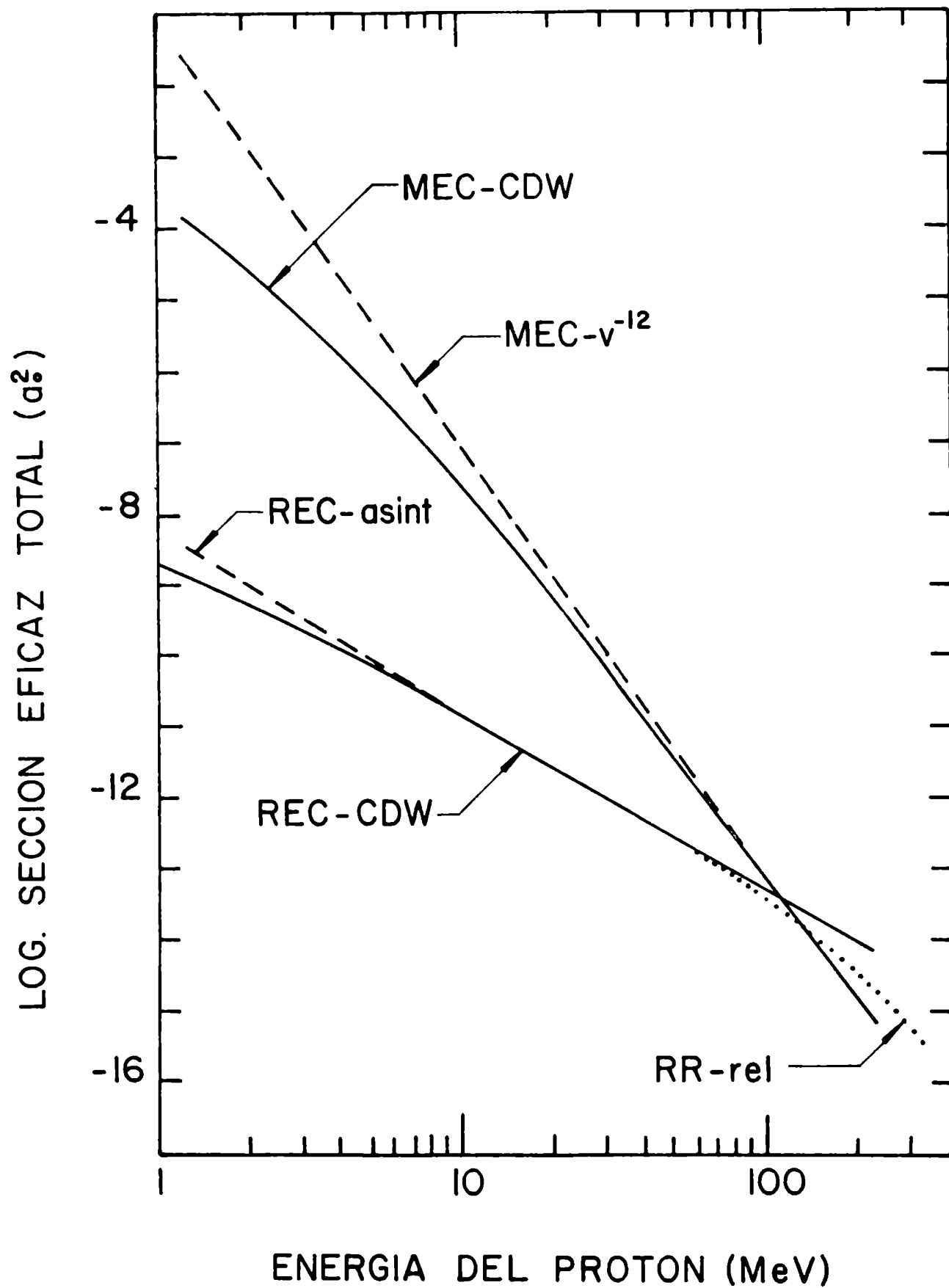


FIGURA 8

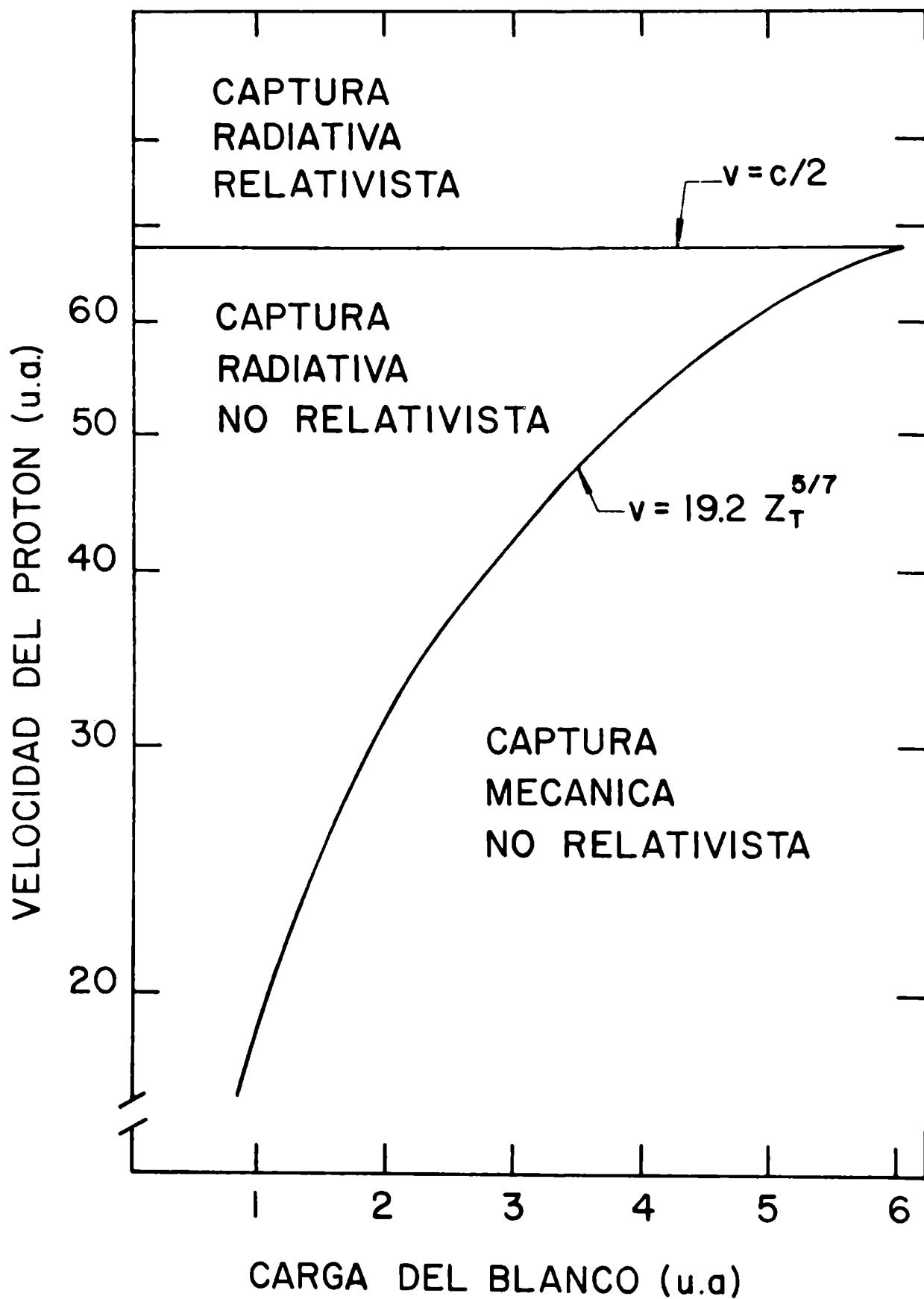


FIGURA 9

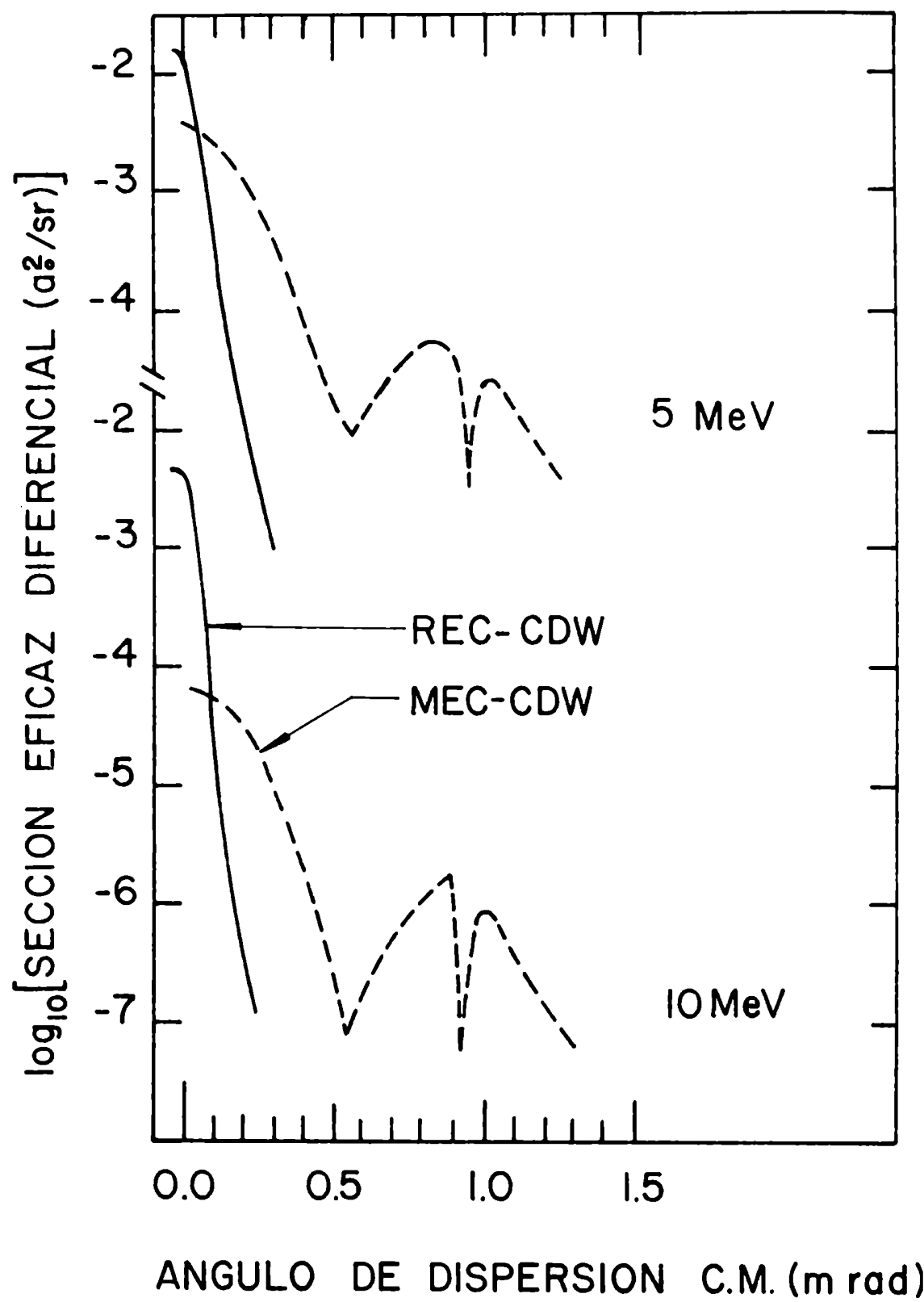
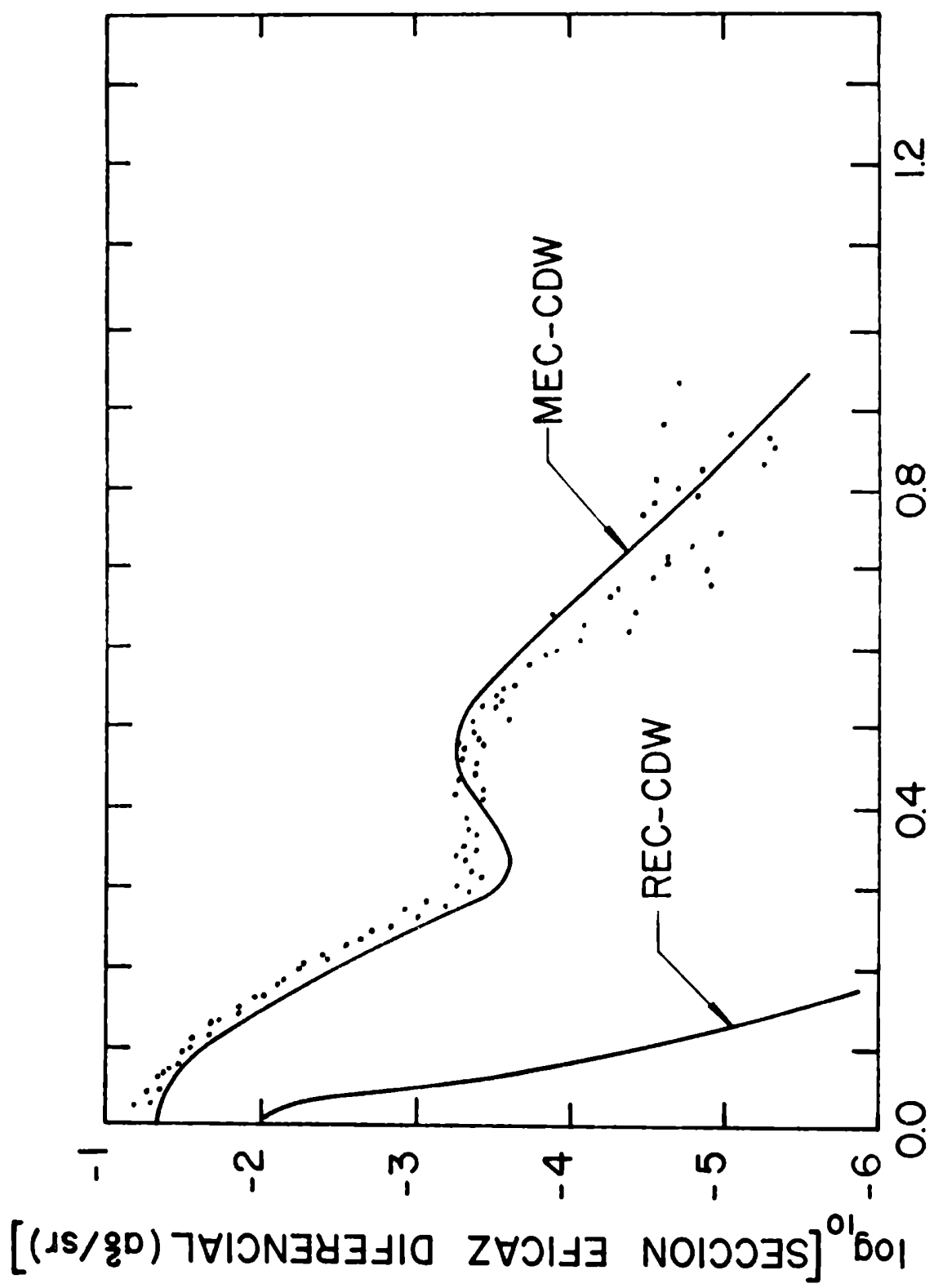


FIGURA 10



ANGULO DE DISPERSION LAB. (m rad)

FIGURA II



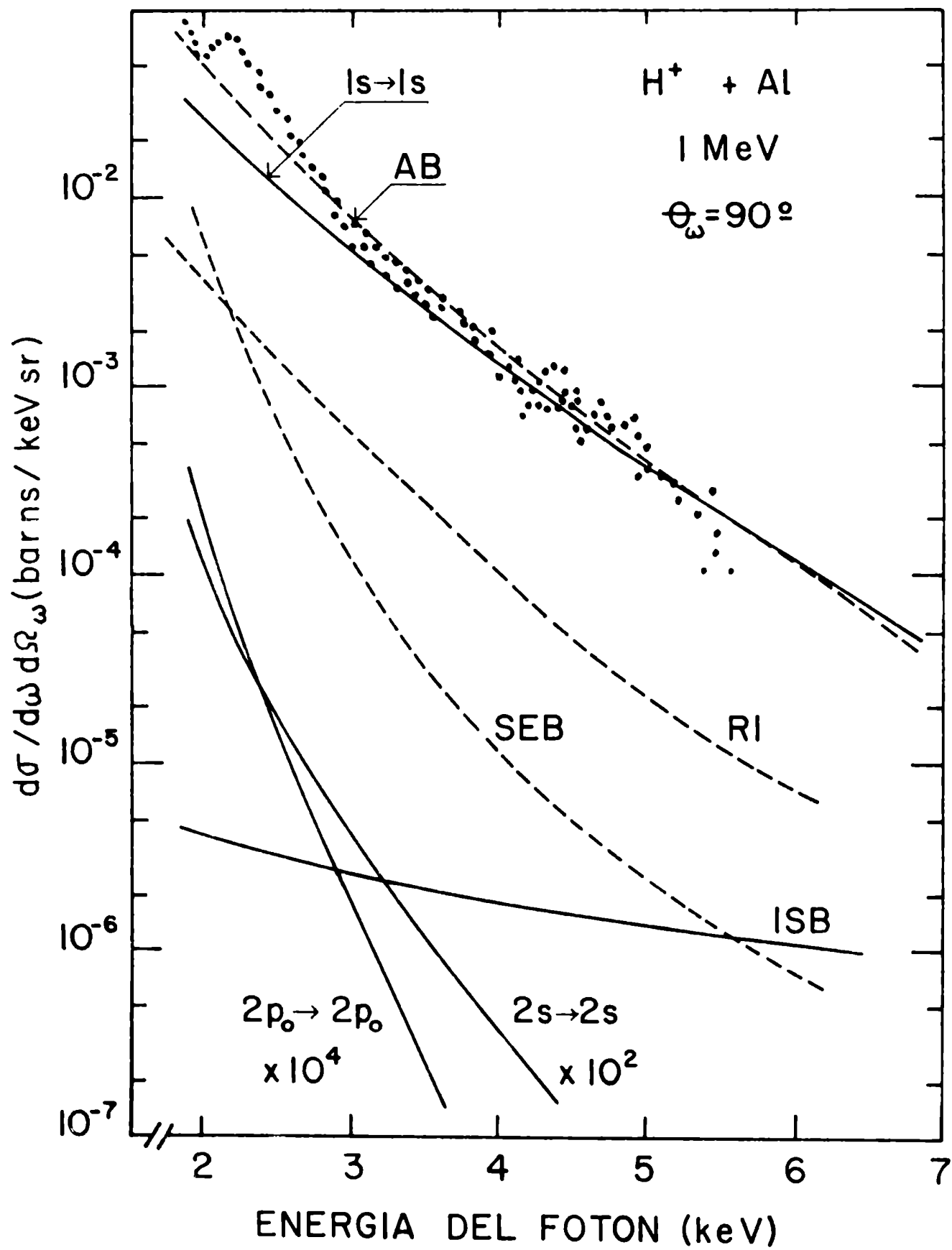


FIGURA 12

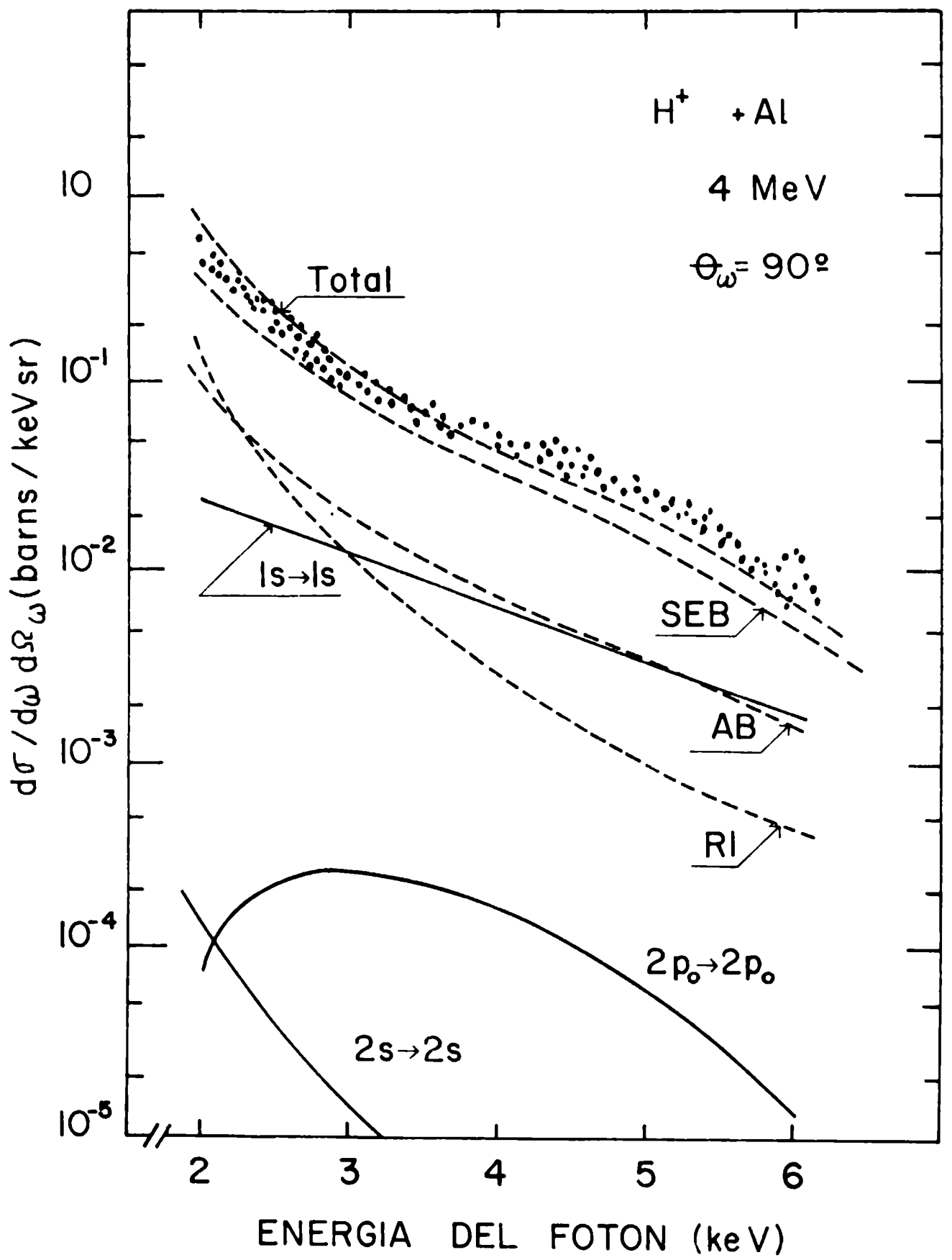


FIGURA 13

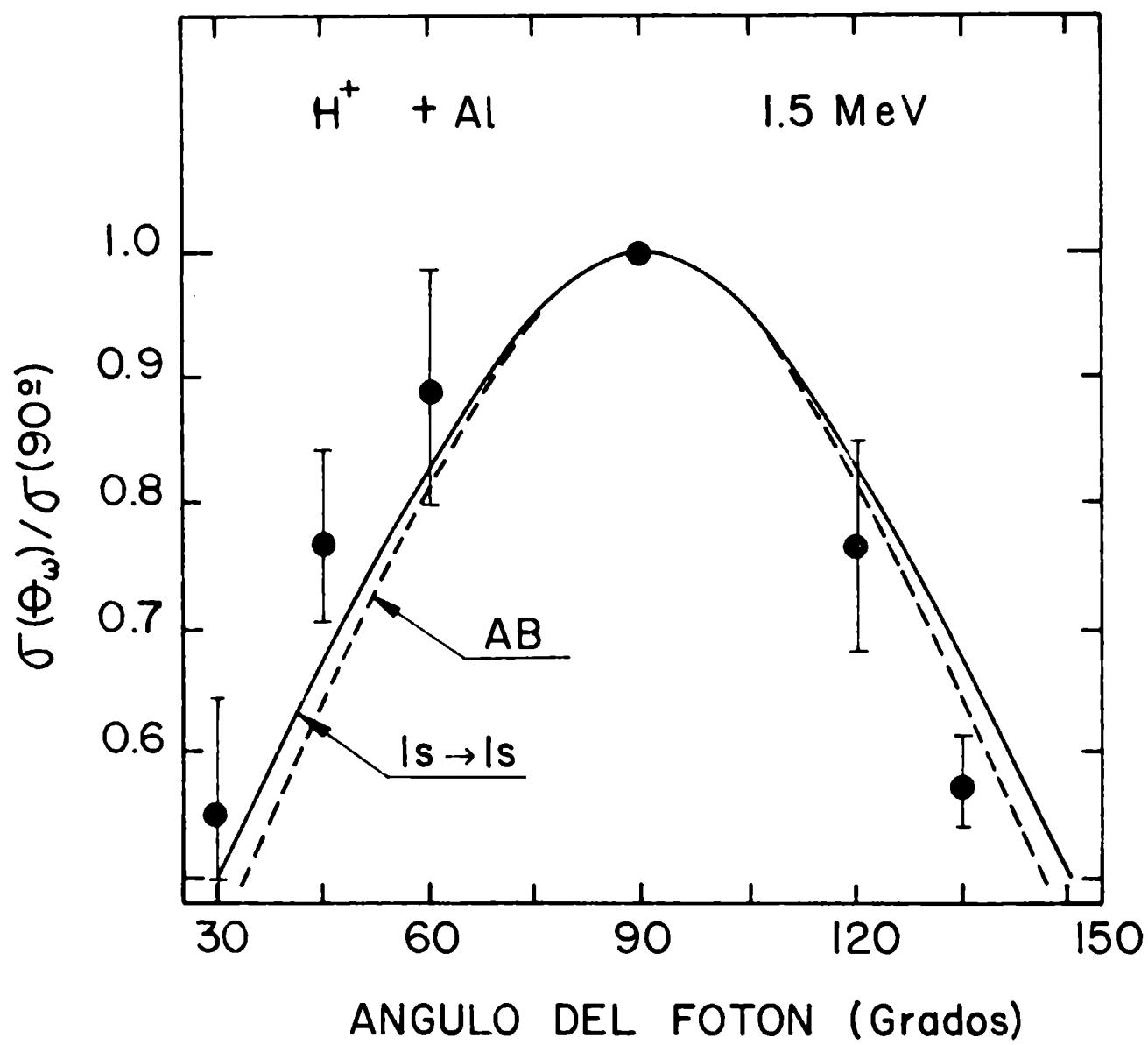


FIGURA 14

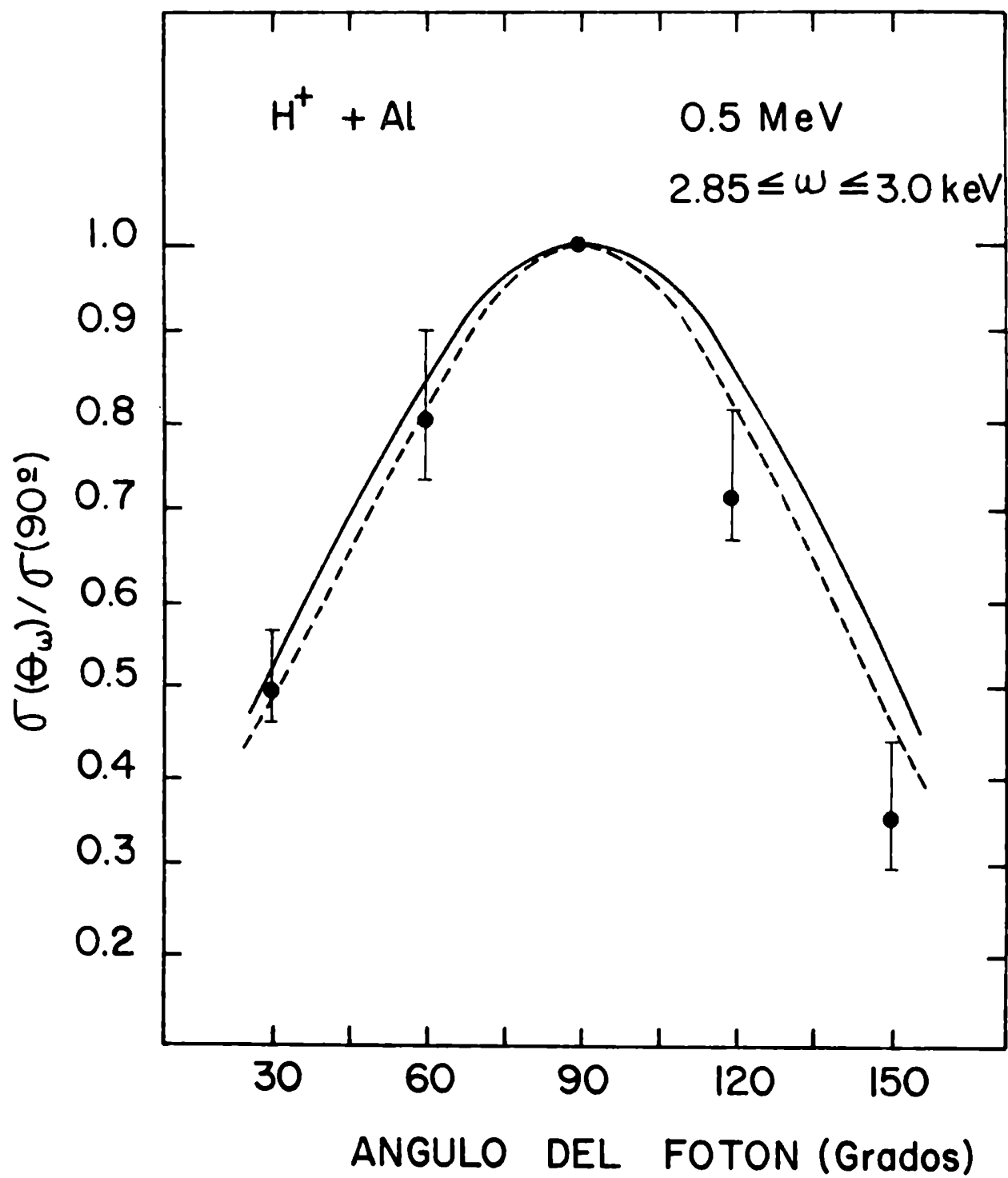


FIGURA 15

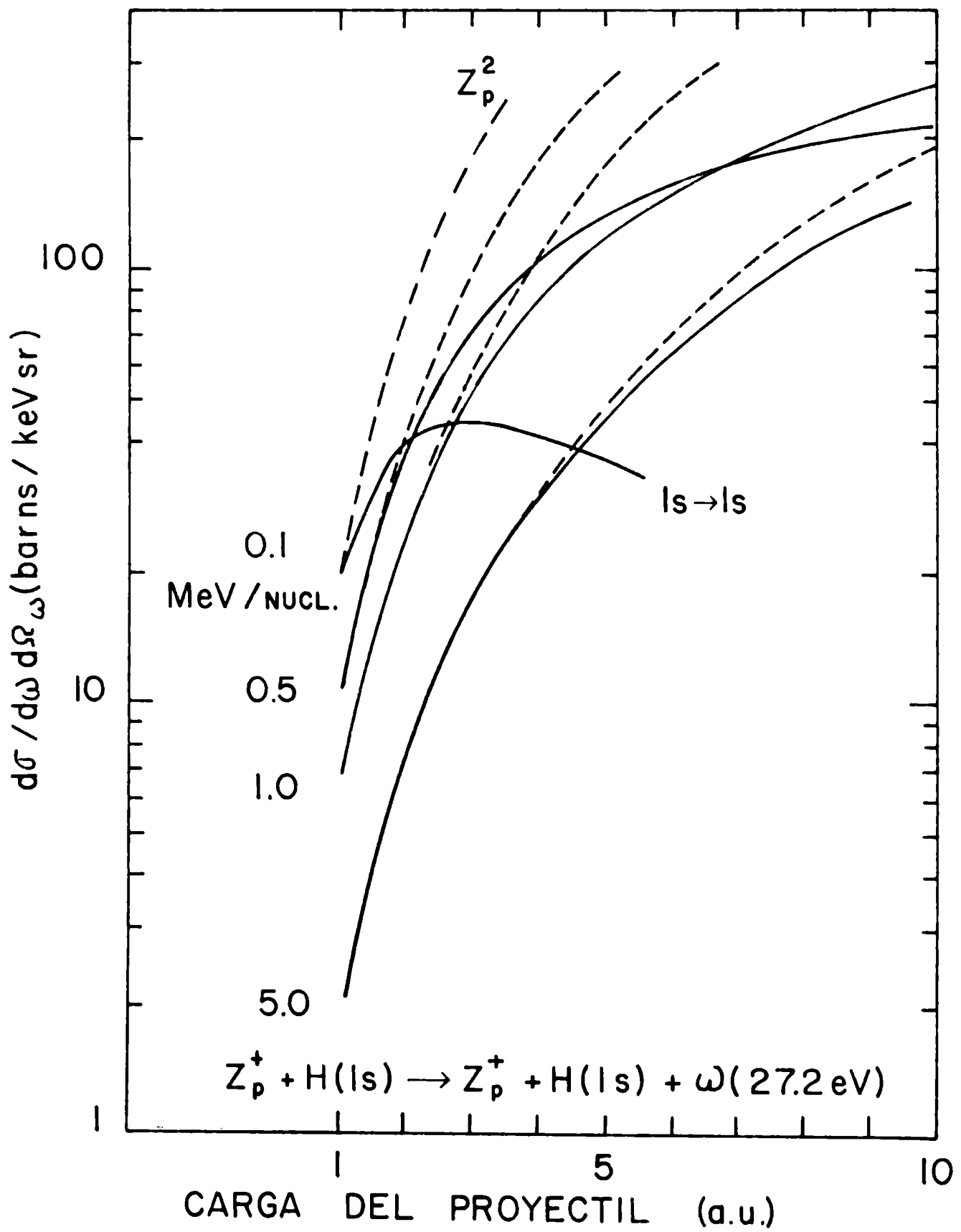


FIGURA 16

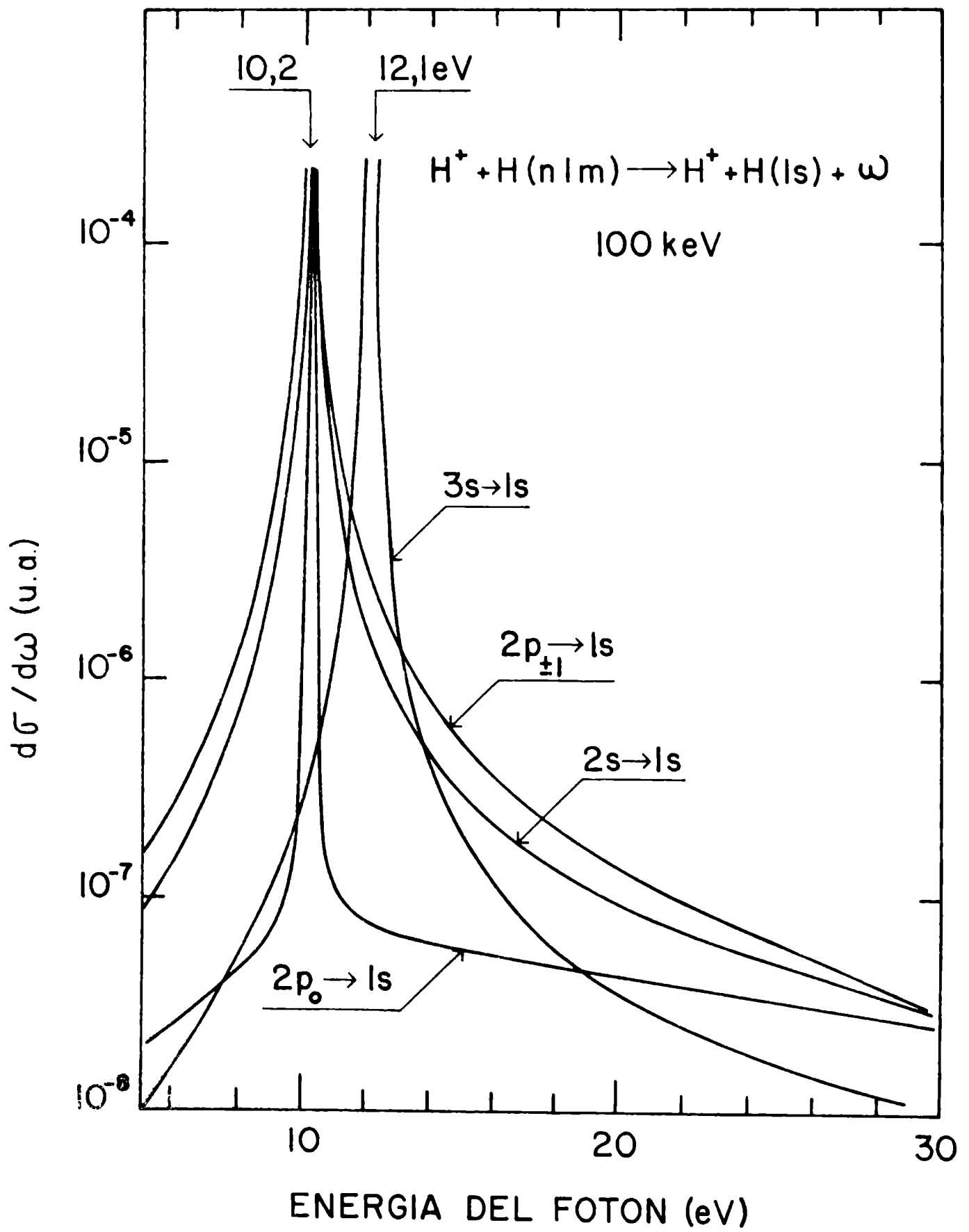


FIGURA 17

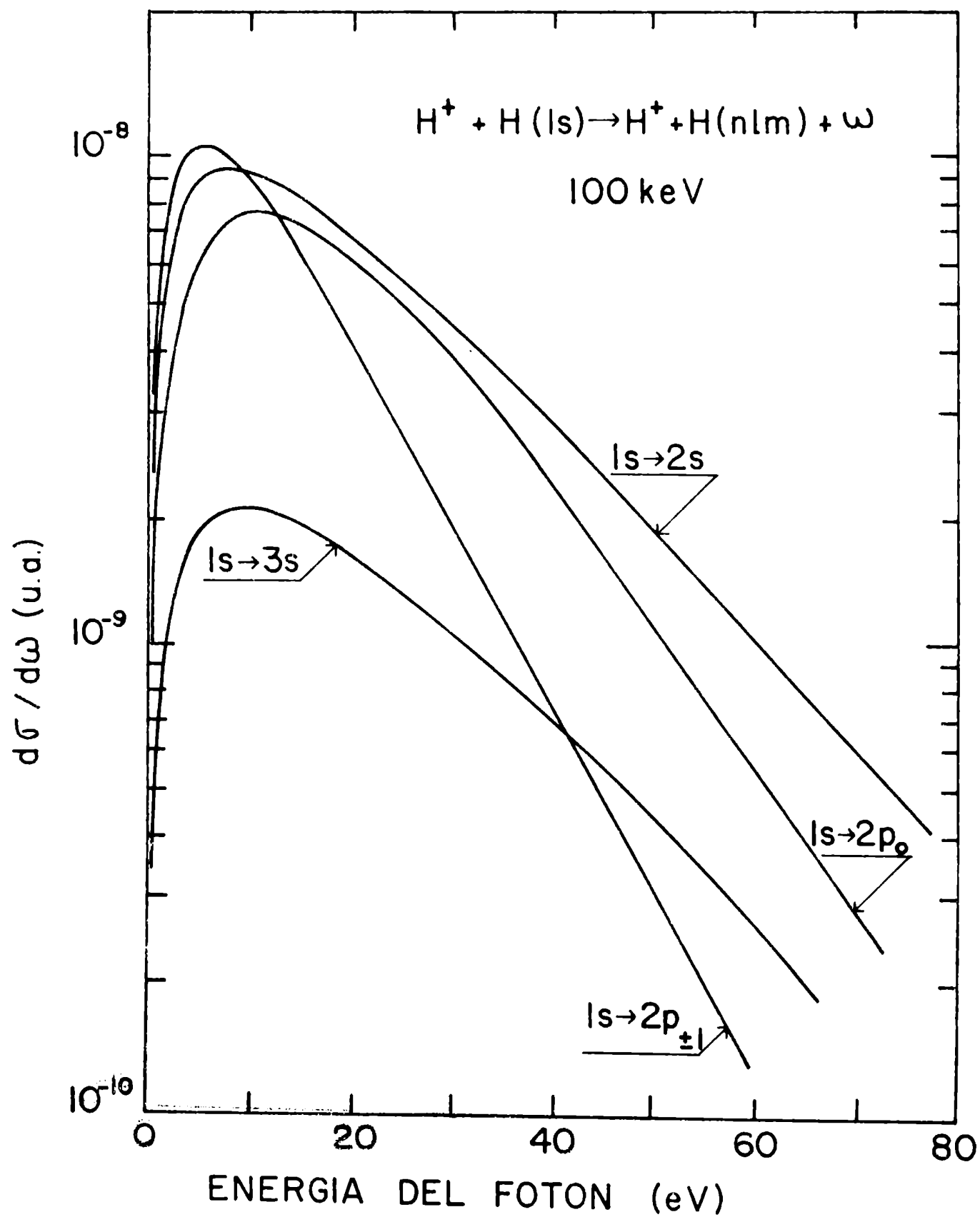
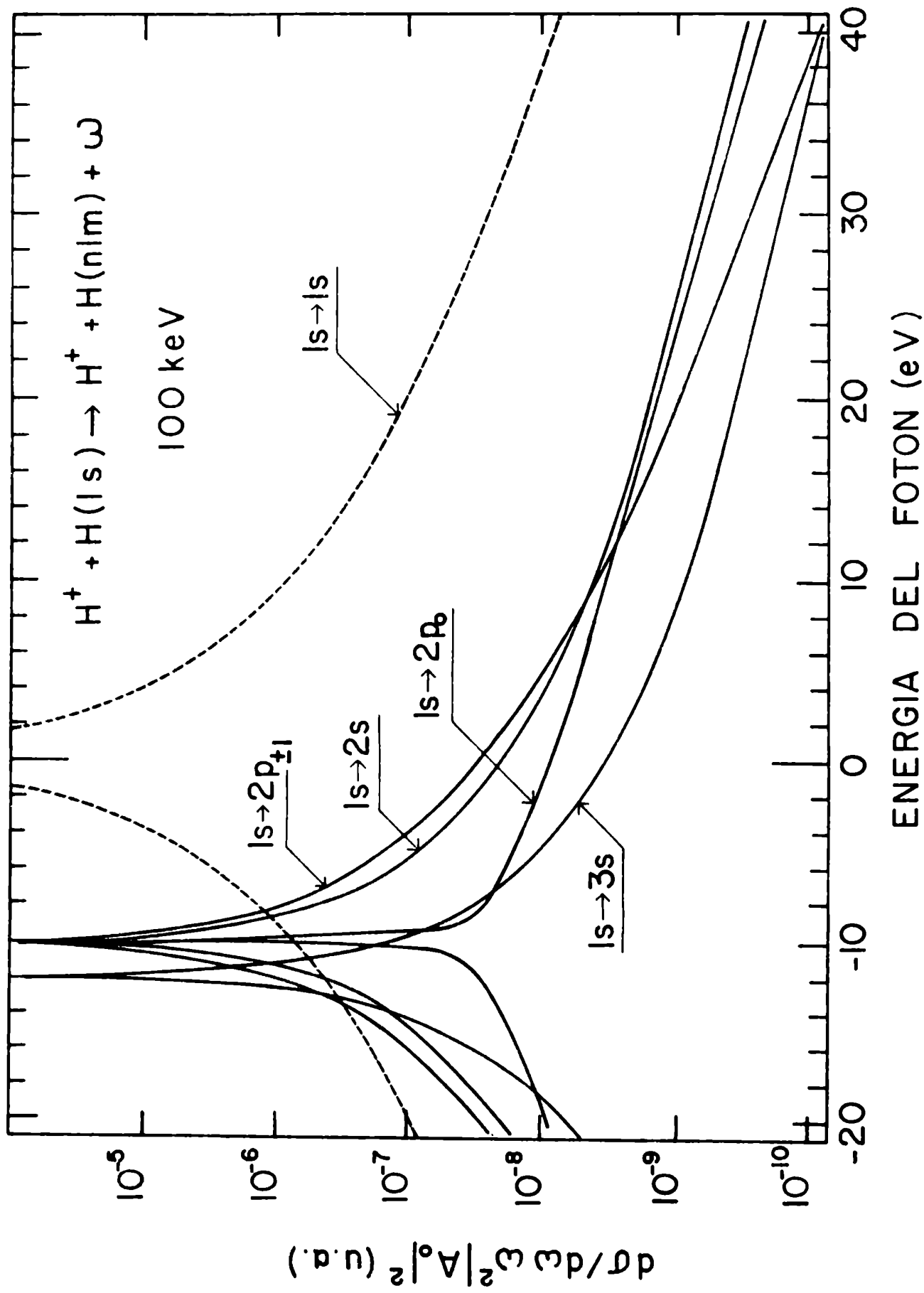


FIGURA 18





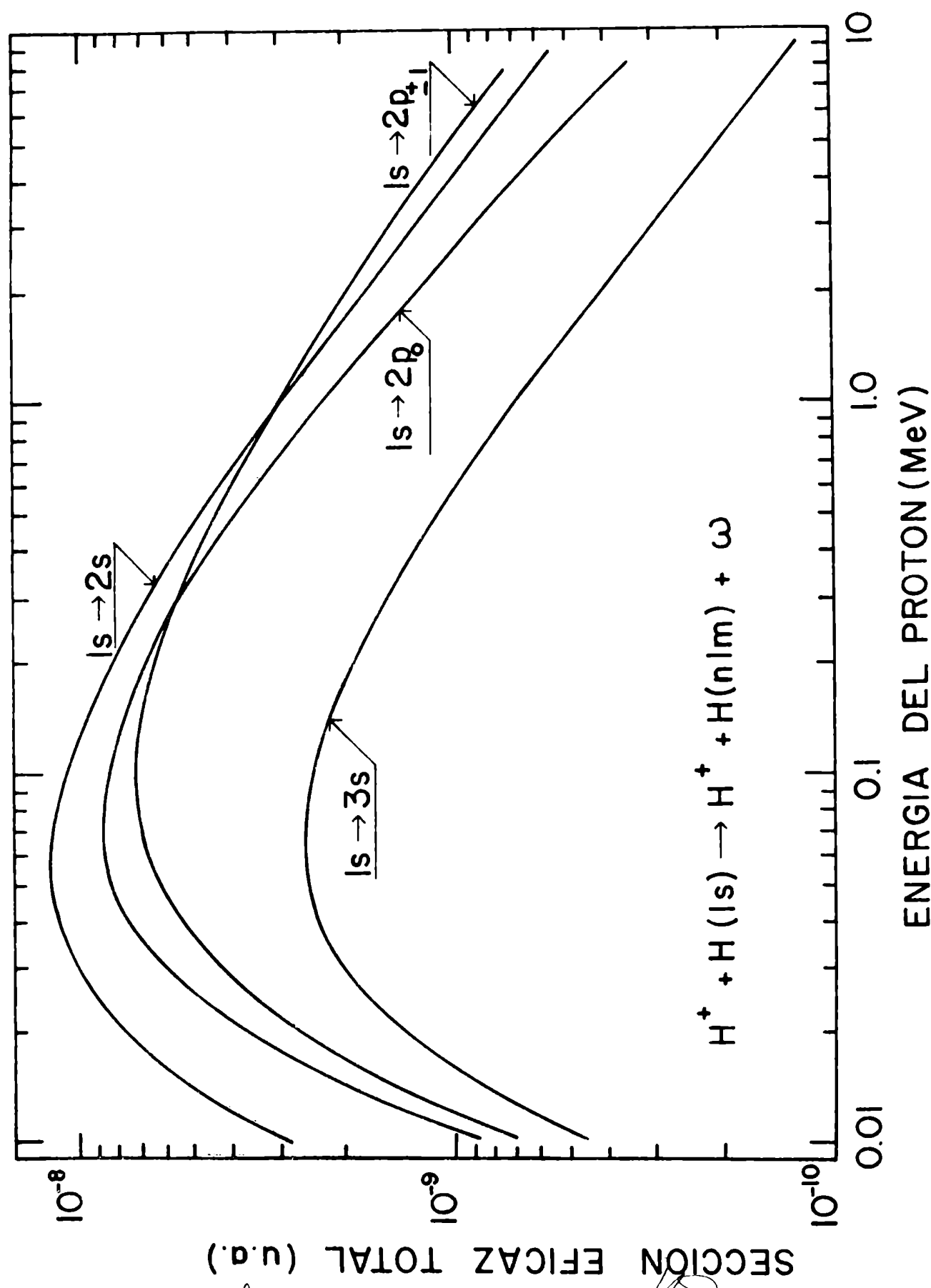


FIGURA 20